



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**DISEÑO DE UNA PLANTA DE
FABRICACIÓN DE AMONIACO VERDE**

por

Sergio Alfaro Blanco

Marco Andrés Fernández

Julia Granda Álvarez

Fernanda Florencia Leoncini Sánchez

Carmen Ana Rodríguez Menéndez

Oviedo, julio de 2025

RESUMEN

El amoníaco es un producto químico esencial para la industria y para la civilización, tal y como la conocemos, ya que permite la fabricación a gran escala de fertilizantes nitrogenados esenciales para mantener la productividad de los campos de cultivo. Tradicionalmente el amoníaco se produce mediante el proceso Haber-Bosch, que utiliza metano como materia prima para la obtención del hidrógeno; se estima que el 1.8% de las emisiones de gases de efecto invernadero a nivel mundial son culpa de la fabricación de amoníaco. Dada la situación climática actual, resulta de vital importancia reducir las emisiones de gases de efecto invernadero a la atmósfera, con el objetivo de mantener el ascenso de temperatura global por debajo de los 2 °C, tal y como se ha pactado en el Acuerdo de París (Naciones Unidas 2015).

Este trabajo estudia la viabilidad de una planta asturiana de producción de amoníaco verde, limpio y sostenible con una capacidad de 116 000 t/año, con el objetivo de contribuir a transición ecológica y fomentar el desarrollo industrial y económico de la región, mediante un proceso seguro y respetuoso con el medio ambiente.

Para ello, se plantea sustituir el reformado tradicional de metano por la electrólisis del agua como fuente de hidrógeno, reduciendo así la huella de carbono del proceso. Para la obtención del nitrógeno se ha optado, siguiendo el criterio de bajas emisiones, por utilizar aire atmosférico; para ello, el aire se purifica en una sección de pretratamiento y, posteriormente, se somete a una destilación criogénica.

De forma complementaria a la producción de amoníaco verde, se generan como subproducto varias corrientes de oxígeno que pueden ser vendidos a otras industrias, contribuyendo así a compensar los elevados costes de funcionamiento de la planta. Tras hacer la evaluación económica se ha obtenido que el beneficio total por la venta de los productos podría oscilar, de manera realista, entre los 144 y los 160 M€. Considerando una inversión inicial de 375.3 M€ y unos costes de operación de 77.4 M€ anuales, resulta posible amortizar el proyecto en un plazo de entre 7 y 9 años. Por tanto, tanto la viabilidad técnica como económica han quedado demostradas.

EXECUTIVE SUMMARY

Ammonia is an essential chemical product for industry and for modern civilization, as it enables large-scale production of nitrogen-based fertilizers that are crucial for maintaining agricultural productivity. Traditionally, ammonia is synthesized via the Haber-Bosch process, which uses methane as a feedstock for hydrogen production. It is estimated that approximately 1.8% of global greenhouse gas emissions are attributable to ammonia manufacturing. Given the current climate crisis, it is imperative to reduce greenhouse gas emissions to limit the global temperature rise to below 2 °C, as agreed in the Paris Agreement (Naciones Unidas 2015).

This study assesses the feasibility of establishing a green, clean, and sustainable ammonia production plant in Asturias (Spain), with a capacity of 116,000 tonnes per year. The objective is to contribute to the ecological transition and to contribute to the industrial and economic development in the region through a process that is both safe and environmentally friendly.

To achieve this, the conventional methane steam reforming route is replaced with water electrolysis as the source of hydrogen, thereby significantly reducing the carbon footprint of the process. For nitrogen supply, atmospheric air is selected in accordance with low-emission criteria; the air is purified in a pretreatment section, afterwards undergoes through cryogenic distillation.

Additionally, the process generates oxygen streams as a by-product, which can be sold to other industries, thereby helping to offset the high operational costs of the facility. The economic assessment estimates that total revenue from product sales could realistically range between €144 million and €160 million. Considering an initial capital investment of 375.3 M€ and annual operating costs of 77.4 M€, the project could be amortized over a period of 7 to 9 years. Therefore, both the technical and economic feasibility of the project have been demonstrated.

ÍNDICE

1.	CONSIDERACIONES PREVIAS	13
1.1.	El amoníaco	14
1.2.	Obtención de nitrógeno	17
1.2.1.	Justificación del método escogido	18
1.2.1.1.	Destilación criogénica	18
1.2.1.2.	Separación por membranas	19
1.2.1.3.	Sistema PSA	19
1.3.	Obtención de hidrógeno	20
1.4.	El Oxígeno	22
2.	OBJETO	24
3.	DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	26
3.1.	Localización de la planta	27
3.2.	Potencial económico y tamaño de la planta	30
3.2.1.	Estudio sobre el mercado	30
3.2.1.1.	Consumo de hidrógeno y emisiones derivadas de su obtención	30
3.2.1.2.	Producción en España de amoníaco	30
3.2.1.3.	Coste del amoníaco en el mercado	31
3.2.1.4.	Pureza del amoníaco que se vende en el mercado	32
3.2.2.	Estimación de ingresos por ventas	32
3.2.2.1.	Alternativa 1	33
3.2.2.2.	Alternativa 2	34
3.3.	Planteamiento	35
3.3.1.	Sección I. Pretratamiento del aire	36
3.3.1.1.	Eliminación de contaminantes sólidos	36
3.3.1.2.	Equipos para la eliminación de contaminantes homogéneos	37
3.3.2.	Sección II. Destilación criogénica	39

3.3.2.1.	Sección de licuefacción	39
3.3.2.2.	Sección de destilación	40
3.3.3.	Sección III. Electrólisis del agua	41
3.3.3.1.	Fundamentos de la electrólisis	41
3.3.3.2.	AWE	43
3.3.4.	Sección IV. Sistema de reacción para la síntesis de amoníaco	43
3.3.4.1.	Configuraciones para el sistema de reacción	43
3.3.4.2.	Catalizadores en la síntesis de amoníaco	45
3.3.5.	Sección V. Separación y purificación del producto	46
3.4.	Diagrama de bloques simplificado	47
4.	BALANCES DE MATERIA Y DE ENERGÍA	49
5.	DIAGRAMA DE FLUJO GENERAL	56
	SECCIÓN I: PRETRATAMIENTO DEL AIRE	58
	SECCIÓN II: DESTILACIÓN CRIOGÉNICA	119
	SECCIÓN III: HIDRÓLISIS DEL AGUA	176
	SECCIÓN IV: REACTOR DE SÍNTESIS	242
	SECCIÓN V: SEPARACIÓN Y PURIFICACIÓN DE PRODUCTOS	305
6.	TUBERÍAS E INSTRUMENTACIÓN	366
6.1.	Diagrama de instrumentación (sección IV)	367
6.2.	Cálculo de las pérdidas por fricción en los distintos tramos de tubería (Secciones I, III y IV)	369
6.2.1.	Introducción	369
6.2.2.	Pérdidas de fricción de cada sección	371
6.2.2.1.	Sección I	371
6.2.2.2.	Sección III	373
6.2.2.3.	Sección V	376
7.	INTEGRACIÓN ENERGÉTICA	383
7.1.	Introducción	384
7.2.	Curvas compuestas caliente y fría	385
7.3.	Curva compuesta global	387
7.4.	Topología de la red de cambiadores de calor	389

8.	CONSIDERACIONES DE SEGURIDAD E IMPACTO AMBIENTAL	392
8.1.	ANÁLISIS DE RIESGOS	393
8.1.1.	Sección I. Riesgos en el pretratamiento del aire	394
8.1.1.1.	Ruido	394
8.1.1.2.	Riesgo térmico por temperaturas elevadas	395
8.1.2.	Sección II. Riesgos de la separación criogénica	395
8.1.2.1.	Riesgo térmico por temperaturas criogénicas	395
8.1.2.2.	Riesgo de explosión por elevadas presiones	396
8.1.3.	Sección III. Riesgos en la electrólisis del agua	397
8.1.3.1.	Riesgo eléctrico	397
8.1.3.2.	Riesgo de explosión por fugas de hidrógeno	397
8.1.4.	Sección IV. Riesgos del reactor de síntesis	398
8.1.4.2.	Análisis detallado de riesgo y operabilidad (HAZOP)	399
8.1.5.	Sección V. Riesgos en la etapa de separación y purificación	406
8.1.5.1.	Riesgo asociado a explosiones	406
8.2.	ANÁLISIS DE IMPACTO AMBIENTAL	407
8.2.1.	Flora, fauna y biodiversidad	407
8.2.2.	Tierra, suelo, subsuelo y geodiversidad	408
8.2.3.	El aire y el clima	408
8.2.4.	El agua y el medio marino	409
8.2.5.	El paisaje, población y salud humana	410
9.	EVALUACIÓN ECONÓMICA	411
9.1.	COSTE DE EQUIPOS	412
9.2.	INVERSIÓN DE CAPITAL	412
9.3.	COSTES DE OPERACIÓN	414
9.3.1.	Materias primas	414
9.3.2.	Sustitución de los lechos de adsorción y de catalizador	414
9.3.3.	Requerimientos de servicios	415
9.3.4.	Otros costes	415
9.3.5.	Costes de mano de obra	416

9.4. BALANCE ECONÓMICO	417
10. CONCLUSIONES	419
11. BIBLIOGRAFÍA	422
APÉNDICE A: LISTA DE SÍMBOLOS	443
A.1. Símbolos latino	444
A.2. Símbolos griegos	444
A.3. Abreviaturas	444
A.4. Nomenclatura propia del código ASME	444
APÉNDICE B: TABLAS Y GRÁFICAS	445
B.1. Tuberías e instrumentación	446
B.2. Integración energética	452
B.3. Evaluación económica	457
APÉNDICE C: NORMATIVA MEDIOAMBIENTAL	461
C.1. Almacenamiento de las materias primas y los productos	462
C.1.1. Almacenamiento del amoniaco	462
C.1.2. Almacenamiento del hidrógeno	463
C.2. Transporte DE LAS MATERIAS PRIMAS Y PRODUCTOS	464
C.2.1. Transporte del amoniaco	464
C.3. EMISIONES DEL PROCESO	464

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla I. Características de las distintas tecnologías de electrólisis (El-Shafie 2023). PEM: Electrólisis de membrana polimérica protónica, SOEC: Celda de electrolizador de óxido sólido, AEM: Electrólisis de membrana de intercambio aniónico.	21
Tabla II. Clasificación de los distintos tipos de oxígeno según su pureza (Sensor One Stop 2024)	23
Tabla III. Valoración numérica de los distintos criterios para la selección de la localización de la planta.	28
Tabla IV. Producción anual y pureza de los productos de la planta.	32
Tabla V. Estimación de ingresos por ventas según la alternativa 1	34
Tabla VI. Estimación de ingresos por ventas según la alternativa 2.	34
Tabla VII. Concentración máxima de contaminantes que pueden entrar a la doble columna Linde (Kumar et al. 2003).	38
Tabla VIII. Ventajas y desventajas de los métodos PSA y TSA para la eliminación de contaminantes gaseosos antes de la destilación criogénica (Zhang, Wang y Wang 2024; Kumar et al. 2003).	39
Tabla IX. Puntos de ebullición de los componentes puros a 200 atm (Aspen HYSYS).	46
Tabla X. Balances de materia. Parte 1 (corrientes 1 a 12)	50
Tabla XI. Balances de materia. Parte 2 (corrientes 15 a 27)	51
Tabla XII. Balances de materia. Parte 3 (corrientes 28 a 36)	52
Tabla XIII. Balances de materia. Parte 4 (corrientes 37 a 45)	53
Tabla XIV. Balances de materia. Parte 5 (corrientes 46 a 54)	54
Tabla XV. Balances de materia. Parte 6 (corrientes 55 a 66)	55
Tabla XVI. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección I. Parte 1.	372
Tabla XVII. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección I. Parte 2.	372
Tabla XVIII. Carga (m) requerida por una bomba en cada tramo.	374
Tabla XIX. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección III. Parte 1	375
Tabla XX. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección III. Parte 2	375
Tabla XXI. Parámetros de Baker tras las dos condensaciones.	377

Tabla XXII. Pérdidas de fricción del líquido y del gas para las corrientes 48 y 50 y parámetro X.	379
Tabla XXIII. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección V. Parte 1.	381
Tabla XXIV. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección V. Parte 2.	382
Tabla XXV. Datos de las corrientes extraídas de la sección V para la integración energética.	384
Tabla XXVI. Datos de las corrientes extraídas de las secciones I a IV para la integración energética.	385
Tabla XXVII. Cascada de energía para la curva compuesta fría.	386
Tabla XXVIII. Ejemplo de cálculo de variación de ΔH_{int} para las corrientes de la sección III.	388
Tabla XXIX. Resumen de la cascada de energía del proceso.	389
Tabla XXX. Palabras guía fundamentales y su significado.	400
Tabla XXXI. Análisis HAZOP al reactor. Palabra guía: NO.	401
Tabla XXXII. Análisis HAZOP al reactor: Palabra guía: MÁS.	402
Tabla XXXIII. Análisis HAZOP al reactor: Palabra guía: MENOS.	403
Tabla XXXIV. Análisis HAZOP al reactor. Palabra guía: MAYOR QUE / PARTE DE.	404
Tabla XXXV. Análisis HAZOP al reactor. Palabra guía: DE OTRA FORMA	405
Tabla XXXVI. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección V. Parte 2.	449

APÉNDICES:

Tabla B.I. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección I. Parte 1.	446
Tabla B.II. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección I. Parte 2.	446
Tabla B.III. Valores típicos de los términos de la Ecuación [9]	446
Tabla B.IV. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección III. Parte 1	447
Tabla B.V. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección III. Parte 2	447
Tabla B.VI. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección V. Parte 1.	448

Tabla B.VII. Cascada de energía de la curva compuesta caliente. Parte 1.	452
Tabla B.VIII. Cascada de energía de la curva compuesta caliente. Parte 2.	453
Tabla B.IX. Cálculo de ΔH_{int} (kW) y cascada de energía del proceso. Parte 1	454
Tabla B.X. Cálculo de ΔH_{int} (kW) y cascada de energía del proceso. Parte 2	455
Tabla B.XI. Cálculo de ΔH_{int} (kW) y cascada de energía del proceso. Parte 3	456
Tabla B. XII. Cálculo de los costes directos e indirectos del proceso.	457
Tabla B.XIII. Aspectos considerados en el cálculo de los costes.	458
Tabla B.XIV. Número de trabajadores por equipo.	458
Tabla B.XV. Cálculo del VAN del proyecto a 20 años (alternativa 1).	459
Tabla B. XVI. Cálculo del VAN del proyecto a 20 años (alternativa 2).	460

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig.1. Proceso de separación de oxígeno por ITM. Fuente: (Rao y Muller 2007)	17
Fig.2. Esquema de una unidad PSA para la obtención de nitrógeno u oxígeno. Fuente: (Universidad Politécnica de Madrid, 2007)	18
Fig. 3. Acuerdo entre las compañías <i>Cepsa</i> y <i>ACE Terminal</i> para la comercialización de amoniaco verde. Asturias presenta una ubicación ventajosa con respecto a Huelva y Cádiz, ya que se encuentra más cerca del punto de recepción (Benito 2023).	28
Fig. 4. Planos de la parcela industrial seleccionada	29
Fig. 5. Evolución estimada del valor en el mercado del amoniaco hasta el año 2050.	31
Fig. 6. Mapa de España y el norte de África donde se representa por colores el número anual de horas de sol, la leyenda cromática muestra la equivalencia en horas/año. Elaborado en 2023 (Agencia Estatal de Meteorología 2024).	35
Fig. 7. Esquema del sistema de electrólisis del agua (Zeng y Zhang 2010)	42
Fig. 8. Esquema de funcionamiento de un reactor de lecho fijo con etapas de refrigeración intermedia contracorriente (Max Appl 2012).	44
Fig. 9. Esquemas representativas de un sistema de flujo axial y un sistema de flujo radial (Eigenberger y Ruppel 2012).	44
Fig. 10. Estructuras cristalinas de óxido de hierro (Humphreys, Lan y Tao 2021).	45
Fig. 11. Diagrama de bloques simplificado.	48
Fig. 12. Diagrama de flujo general del proceso	57
Fig. 13. Diagrama de instrumentación del reactor de síntesis.	368
Fig. 14. Bombas utilizadas para la impulsión de fluidos en la Sección II. (A) bomba centrífuga de la Gama Packo (Presión máxima de 40 bar y caudal máximo de 800 m ³ /h)(«Packo General Industrial Series - Bomba centrífuga by Verder Liquids DirectIndustry»). (B)bomba centrífuga de la gama Shallowglide (H _{Máxima} de 130 m y caudal máximo de 30 000 m ³ /h) («Swallowglide - Bomba centrífuga by Celeros DirectIndustry»)	375
Fig.15.Mapa de Baker.	377
Fig. 16. A) Válvula reductora de presión para la corriente 62.(Valfonta 2016). B) Válvula reductora de presión para la corriente 64. («ECOTROL® modular straight-way control valve ARCA» 2025)	380
Fig.17.Curvas compuestas caliente y fría.	386

Fig. 18. Curvas compuestas caliente y fría ($\Delta T_{\min}$ de 251 °C).	387
Fig. 19. Curva compuesta global con servicios y temperatura máxima de suministro.	389
Fig. 20. Red 1 de cambiadores de calor de las corrientes frías minimizando el número de intercambiadores de calor ($\Delta T_{\min} = 20^{\circ}\text{C}$).	391
Fig. 21. Red 2 de cambiadores de calor de las corrientes frías combinando corrientes de la misma sección o continua ($\Delta T_{\min} = 20^{\circ}\text{C}$).	391
Fig. 22. Nodo al que se realiza el análisis HAZOP.	400
Fig. 23. Cartografía de la Red Natura 2000 en las inmediaciones del polígono industrial Zalia. Rodeado con línea semicontinua el polígono Zalia. ZEPA es “Zona de Especial Protección para Aves”. ZEC es “Zona Especial de Conservación”. LIC es “Lugares de Importancia Comunitaria”.	409
Fig. 24. VAN del proceso a 20 años vista	417

APÉNDICES:

Fig. B.1. Diámetros normalizados de tuberías, primera parte. («tioga-pipe-chart-»).	450
Fig. B.2. Diámetros normalizados de tuberías, segunda parte («tioga-pipe-chart-»).	451
Fig. B.3. Curvas compuestas caliente y fría ($\Delta T_{\min}$ de 20 °C).	457

1. CONSIDERACIONES PREVIAS

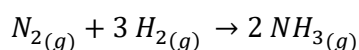
1.1. EL AMONIACO

La fabricación industrial del amoniaco data de principios del siglo XX, cuando Fritz Haber, Carl Bosch y sus compañeros diseñaron un proceso escalable a tamaño industrial. El objetivo era la producción en masa de amoniaco para la fabricación de fertilizantes, muy necesarios en aquella época, debido a la subida en la demanda de alimentos como consecuencia del aumento poblacional durante la revolución industrial.

1.1.1. Características y potencial

El amoniaco (NH_3), en condiciones normales, es un gas tóxico y soluble en agua, que si se mezcla con aire puede dar lugar a reacciones explosivas. Su carácter polar y la posibilidad de formar puentes de hidrógeno hacen que, el punto de fusión y de ebullición tomen valores de $-77.7\text{ }^\circ\text{C}$ y $-33.35\text{ }^\circ\text{C}$, respectivamente. Por ello, en estado líquido, se puede emplear como refrigerante o disolvente de ciertos compuestos polares que contengan nitrógeno (aminas, sales de amonio). Otro posible uso es la producción de compuestos químicos, como el ácido nítrico o la urea, aunque la aplicación más importante es la obtención de fertilizantes. Debido a su potencial peligrosidad, a la hora del almacenamiento, es importante cumplir unas normas de seguridad que garanticen su estabilidad y control (Agüero Guillén, 2017).

El amoniaco se puede producir de manera natural mediante la descomposición de materia orgánica. Industrialmente, el método de obtención convencional se denomina Proceso Haber-Bosch y en él tiene lugar la siguiente reacción, en fase gas, entre el nitrógeno y el hidrógeno para dar lugar al amoniaco (Tegeder, 1966).



1.1.2. Reacción de síntesis y estado del arte

La reacción de síntesis del amoniaco es reversible y exotérmica, por ello, para controlar el equilibrio químico y mejorar la conversión, es necesario trabajar a altas presiones y temperaturas superiores a los $350\text{ }^\circ\text{C}$. Esto provoca que, el consumo energético sea muy elevado, por lo que es importante maximizar el rendimiento. Es necesario emplear un catalizador ya que el nitrógeno es un compuesto muy estable, y, por tanto, la velocidad de reacción es baja. Tradicionalmente, se emplean catalizadores de hierro, aunque se ha descubierto que el rutenio permite trabajar a condiciones de temperatura inferiores y que, a menor presión, conserva una mayor actividad catalítica, aunque conlleve un mayor coste inicial (Goodwin et al., 2024).

En los últimos años se han llevado a cabo diversos estudios de procesos alternativos que permitan la obtención de este producto, entre los que destaca la electrocatálisis (Mohan y Ramanujam, 2024). Sin embargo, la tecnología que implica estos procesos no ha alcanzado un nivel de madurez suficiente y el proceso Haber-Bosh sigue liderando la producción de amoníaco a gran escala.

A la hora de obtener el nitrógeno, se suele recurrir a la separación de los componentes del aire, ya que, aproximadamente el 78 % de este está compuesto por N_2 . Por otro lado, el hidrógeno, generalmente, se obtiene por reformado con vapor de metano, formándose también, dióxido de carbono. Cuando este se obtiene por esta vía se denomina *hidrógeno gris* (MITECO, 2019).

Otra forma tradicional de obtención de hidrógeno es la gasificación de carbones, para generar un gas de síntesis (syngas) compuesto por CO , CO_2 , H_2 , H_2O , N_2 y CH_4 . De esta manera, el hidrógeno se clasifica como *marrón o negro* (dependiendo del tipo de carbón utilizado), ya que conlleva al uso de combustibles fósiles y a grandes emisiones de gases de efecto invernadero. La integración de estos procesos con sistemas de captura y almacenamiento de carbono permiten obtener *hidrógeno azul* («Sitio web del Hidrógeno», 2025).

Estas denominaciones para el hidrógeno, en función del método de producción, se transmiten a la forma de nombrar al amoníaco, siendo la vía de obtención de esta materia prima la que determina el impacto ambiental del proceso de fabricación del NH_3 .

El proceso más extendido en la actualidad, a escala industrial, es el de fabricación de amoníaco gris, pero uno de sus grandes inconvenientes es la producción de CO_2 asociada a la obtención del hidrógeno. Por un lado, es necesario hacer una separación de ese dióxido de carbono previa a la entrada al reactor de síntesis, por medio, por ejemplo, de una adsorción. Por otro lado, dependiendo de la fuente de obtención del hidrógeno, tal vez sea necesario someter a las corrientes a etapas adicionales de purificación y limpieza, por ejemplo, si la materia prima de partida es el coque, será necesario eliminar trazas de azufre mediante una torre de absorción, para evitar el envenenamiento de catalizadores posteriores (Tegeder, 1966).

Actualmente, se están instaurando una serie de medidas que avanzan hacia la sostenibilidad, mejorando la eficiencia energética y minimizando el derroche de recursos, siguiendo los principios de la “Química Verde”. Este es un concepto que surgió en los años 90, que se basa en el diseño de productos y procesos químicos que permitan reducir el uso y la generación de sustancias nocivas (Anastas y Eghbali, 2010).

Basado en este novedoso campo, surge el *amoniaco verde*, el cual se obtiene a partir de hidrógeno obtenido por medio de una electrólisis de agua empleando fuentes de energía renovables, lo que permite minimizar las emisiones de gases de efecto invernadero (*hidrógeno verde*) («Amoníaco verde», 2025).

Por otro lado, el hidrógeno es un vector energético, ya que es capaz de almacenar y transportar una gran cantidad de energía para ser utilizada cuando sea conveniente; sin embargo, no es un recurso natural como el carbón, ya que hay que producirlo a partir de otras materias primas consumiendo una energía primaria (renovable o fósil). El almacenamiento y el transporte de este debe realizarse en forma de gas comprimido (300-700 bar) o como líquido, a temperaturas criogénicas (su punto de ebullición es de -253 °C). Para valorar cuánta energía es capaz de contener un vector energético se puede analizar la densidad energética por unidad de volumen o masa. El hidrógeno es capaz de almacenar 33.59 kWh/kg mientras que los combustibles fósiles no superan los 14 kWh/kg. En contrapartida, al ser un gas tan ligero, la capacidad de almacenamiento de energía por unidad de volumen es inferior que la del resto. Esto puede provocar problemas a la hora de su almacenamiento y distribución, requiriendo condiciones ambientales muy severas, lo que complica el diseño de dicha red, a pesar de haber múltiples estudios sobre ello (Linares Hurtado y Moratilla Soria, 2007).

Otra opción de almacenar el hidrógeno es en forma de otros compuestos químicos, siendo en esta aplicación donde puede jugar un papel relevante el amoniaco. Para este, existe una red de distribución ya establecida: el amoniaco destaca por su facilidad de manejo frente al hidrógeno, aunque también requiere enfriamiento, las condiciones de presión y temperatura son más moderadas que para el hidrógeno. No quiere ello decir que su transporte sea sencillo, es un compuesto peligroso y su movimiento, en grandes cantidades, siempre puede ocasionar problemas. En cualquier caso, el coste de almacenamiento del amoniaco frente al hidrógeno líquido se ha estimado en 10 veces más barato, siéndolo aún más su transporte, cuyo valor es unas 47 veces inferior. En cuanto a la densidad energética gravimétrica, la del amoniaco es de 6.25 kWh/kg, por lo que podría descomponerse para obtener hidrógeno de nuevo, pero también, emplearse directamente en pilas de combustible de óxido sólido (SOFC) o como combustible para transporte marítimo. Es decir, y este aspecto es clave, el amoniaco puede actuar como vector energético directo o indirecto. Finalmente, otra posibilidad sería emplearlo en turbinas o motores, si bien es cierto que la combustión del amoniaco es aún un desafío, debido a su alta energía mínima de ignición y posibles emisiones de NO_x (Salmon y Bañares-Alcántara, 2021).

Por tanto, a pesar de que, actualmente, este sector afronta una serie de dificultades tanto a nivel técnico como ambiental, parece que a medida que se desarrollen las tecnologías verdes y se optimice la síntesis del amoniaco verde, la rentabilidad de emplearlo como vector

energético aumentará en gran medida, avanzando hacia la descarbonización (Bora et al., 2024).

1.2. OBTENCIÓN DE NITRÓGENO

En primer lugar, se debe llevar a cabo un análisis de alternativas para la obtención de las materias primas del proceso, las que para la síntesis de amoníaco por el proceso Haber-Bosch serán nitrógeno e hidrógeno puros.

En el caso de la obtención del nitrógeno se han planteado principalmente tres opciones:

- 1- **Destilación criogénica:** En este método inicialmente se comprime y enfría la corriente de aire para que los gases que se desean separar licúen. A continuación, se separan los gases por sus temperaturas de ebullición dentro de la columna de destilación. Para dicha destilación se utiliza una doble columna Linde, formada por una columna de alta presión y otra de baja presión situadas una encima de la otra.
- 2- **Separación por membrana:** Este tipo de separación se basa en las diferencias en las velocidades de difusión y la solubilidad de los compuestos a separar.

El nitrógeno y el argón son considerados gases de difusión lenta mientras que el oxígeno es de difusión rápida, lo que hace que atraviese la membrana (permeado). Mientras que el nitrógeno y el argón quedan retenidos, formando parte del producto final de la separación. Se puede observar un esquema del sistema en la Figura 1 (Rao y Muller, 2007).

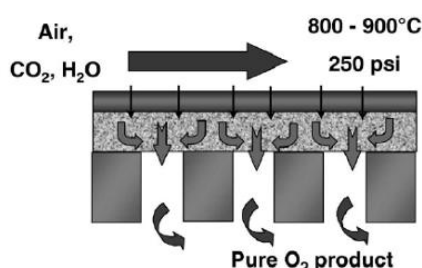


Fig.1. Proceso de separación de oxígeno por ITM. Fuente: (Rao y Muller 2007)

- 3- **Pressure Swing Adsorption (PSA):** Esta tecnología aplica la adsorción a través de tamices moleculares de determinadas sustancias, lo que asegura la separación de la mezcla de aire.

Se trabaja por turnos con dos equipos de adsorción rellenos con un tamiz molecular a carbón (TMC). Se hace pasar el aire por un primer TMC, donde se produce la adsorción preferente del oxígeno a alta presión. Tras la saturación del primer TMC se lleva el aire al siguiente tamiz, en el cual se baja a presión atmosférica y se continúa con la adsorción. (Ruthven *et al.*, 1994)

Se puede observar un esquema general del proceso PSA en la Figura 2.

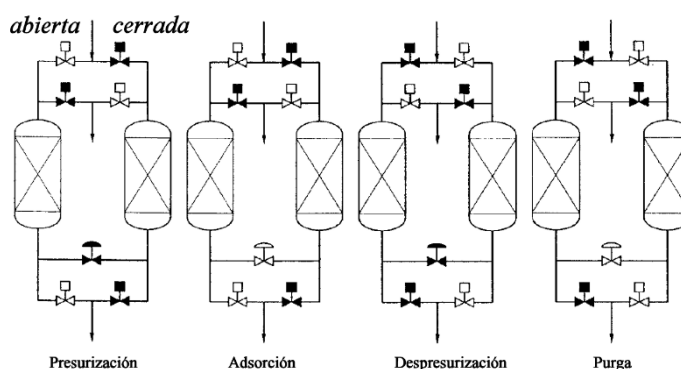


Fig.2. Esquema de una unidad PSA para la obtención de nitrógeno u oxígeno. Fuente: (Universidad Politécnica de Madrid, 2007)

1.2.1. Justificación del método escogido

Para llevar a cabo la comparación necesaria para escoger el método de producción adecuado para la planta hay que tener en cuenta tanto consideraciones económicas como características intrínsecas de cada uno de los métodos. Por ello, a continuación, se hace un resumen de las posibles ventajas y desventajas de cada una de las tecnologías ponderadas.

1.2.1.1. Destilación criogénica

La destilación criogénica parte de la ventaja de que es uno de los métodos de separación del aire más extendidos globalmente. Esto conlleva que sea un método bastante estudiado y con un sistema muy robusto diseñado para la producción industrial. Otro punto a favor de este proceso es la capacidad de producir grandes caudales tanto de oxígeno como de nitrógeno de muy elevada pureza. Esta tecnología también permite obtener los productos tanto en fase gas como en fase líquida, permitiendo así su uso para un mayor rango de aplicaciones.

Cabe destacar que la destilación criogénica es un proceso con un gran consumo energético y con unos costes de capital circulante elevados, debido a la necesidad de mantener los gases a temperaturas extremadamente bajas. Además, tanto las columnas

utilizadas como los equipos de intercambio de calor utilizados requieren un volumen de planta muy grande y mantenimientos frecuentes debido a las altas presiones de operación y las bajas temperaturas que tienden a corroer y fragilizar el material utilizado. (Kister y Gill, 1992)

1.2.1.2. Separación por membranas

Los sistemas de membrana tienen la ventaja principal de estar compuestos por módulos ligeros de volumen relativamente pequeño, por lo que no ocupan una gran superficie de planta para su instalación. También presentan tiempos de arranque muy cortos y debido a la carencia de partes móviles y sus condiciones de operación no demasiado exigentes (casi atmosféricas), ni siquiera es necesario un mantenimiento exhaustivo de los equipos.

Por otra parte, esta tecnología aún no se ha desarrollado lo suficiente como para su uso en producción industrial. Esto se debe principalmente a que los costes de los sistemas de membrana incrementan de forma lineal con la producción deseada y a los problemas para encontrar una relación óptima entre el espesor de membrana y el área superficial de la misma que permita soportar la presión requerida para el flujo (Ruthven *et al.*, 1994).

1.2.1.3. Sistema PSA

La utilización de estos equipos permite llevar a cabo una adsorción selectiva de carácter físico, predominante en estos sistemas frente a la adsorción química, para la obtención de caudales moderados de producto de alta pureza. Esto implica costes de operación reducidos, puesto que la regeneración de los tamices o lechos utilizados es rápida y sencilla, por lo que no son necesarios largos tiempos de preparación.

Los principales inconvenientes de esta técnica son entre ellos la necesidad de un cálculo muy preciso en los tiempos de adsorción, ya que para trabajar en continuo se necesitan tamices/lechos en paralelo. Si no se logra una sincronización adecuada puede ocurrir que la corriente atraviese el tamiz sin ser tratada adecuadamente. La corriente de aire que entra al proceso debe encontrarse limpia de impurezas, para no dañar o afectar al funcionamiento de los tamices moleculares, y las condiciones de temperatura y presión deben ser controladas rigurosamente debido a la alta sensibilidad del sistema. Por último, dado que el proceso trabaja en ciclos con presiones moderadas/altas, se necesita un mantenimiento adecuado para prevenir posibles fugas (Ruthven *et al.*, 1994).

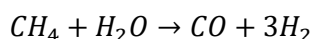
Tras estudiar las ventajas e inconvenientes de cada alternativa y las especificaciones del proceso que se desea llevar a cabo, se llega a la siguiente conclusión. La tecnología de separación por membranas se debe descartar, pues su capacidad de producción no está

desarrollada para alcanzar las cuotas establecidas por la naturaleza del proyecto. Por consideraciones económicas sería más rentable utilizar la tecnología PSA, sin embargo, para la reacción posterior de síntesis de amoníaco, se necesita la mayor pureza posible de los reactivos para evitar posibles reacciones no deseadas o envenenamiento del catalizador, por lo que será mejor emplear la destilación criogénica que permite alcanzar purezas extremadamente altas (>99.95%) fácilmente.

1.3. OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO

Para el caso de la obtención del hidrógeno se plantearon dos opciones, llevar a cabo un reformado de metano (steam reforming) procedente de biogás u obtenerlo a partir de agua por electrolisis.

El biogás generalmente está compuesto por CH₄ (35%-75%), CO₂ (25%-55%), y otros componentes minoritarios, entre los cuales se encuentra N₂, O₂, H₂, CO, H₂S, NH₃, siloxanos, compuestos aromáticos y partículas en suspensión (Kim et al. 2022). Esto conllevaría la necesidad de un tratamiento exhaustivo de la corriente de alimentación de biogás para asegurar cierto grado de pureza del metano deseado. La reacción de reformado se lleva a cabo a presiones y temperaturas elevadas y se expresa de la siguiente forma:



Como se puede observar en la reacción, además del hidrógeno se genera CO como producto no deseado, reduciendo la pureza de la corriente de salida y además siendo un contaminante atmosférico de carácter tóxico por lo que es necesaria su eliminación.

Todas las características del proceso mencionadas anteriormente hacen que, si bien la producción de hidrógeno por este método permite obtener caudales elevados de producto, se requiere de un elevado coste de inversión.

Si se evalúa la electrolisis del agua como método para obtener hidrógeno, se deben considerar las distintas tecnologías desarrolladas y sus características que se pueden apreciar en la Tabla I.

La electrolisis es un proceso electroquímico que se conoce desde hace 200 años, pudiendo ser utilizado para la descomposición del agua en hidrógeno y oxígeno. A pesar de que tiene una ventaja muy significativa, como es producir hidrógeno de una pureza cercana al 100%, sus aplicaciones a nivel industrial siempre han estado limitadas debido a las pérdidas

energéticas producidas por la baja eficiencia operativa del sistema, la baja presión de funcionamiento y la baja densidad de corriente límite (Hou y Yang 2024; Schmidt et al. 2017).

Tabla I. Características de las distintas tecnologías de electrólisis (El-Shafie 2023). PEM: Electrólisis de membrana polimérica protónica, SOEC: Celda de electrolizador de óxido sólido, AEM: Electrólisis de membrana de intercambio aniónico.

Especificación	Alcalina	PEM	SOEC	AEM
Madurez tecnológica	Madura	Comercial	I+D	I+D
Temperatura de celda, °C	65-100	70-90	900–1000	50-70
Presión de celda, bar	25-30	30-80	<30	-30
Densidad de corriente, mA/cm ²	200-500	800-2500	300–1000	200-500
Voltaje de celda, V	1.8-2.4	1.8-2.2	0.95–1.3	1.8-2.2
Consumo energético específico del sistema, kWh/Nm ³	4.5-7.5	5.8-7.5	2.5–3.5	4.8-5.2
Producción de hidrógeno, Nm ³ /h	<760	0.265-30	–	0.25-1
Vida útil, h	10000	<20000	<40,000	NA
Electrolito	20-30% KOH	Ácido perfluorosulfonado (PFSA)	Circonio estabilizado con itria (YSZ)	Soporte de polímero DVB con KOH o NaHCO ₃
Separador	Asbesto, NiO, ZrO ₂ , estabilizado con membrana PPS	PFSA	Electrolito sólido	Polisulfona de amoniaco cuaternario (QAPS)
Pureza del hidrógeno, (vol%)	99.3-99.9	99.999	-	99.99
Coste de capital (€/kW _{el})	1000-1200	1860-2320	>2000	NA

En la actualidad existen cuatro métodos principales de electrólisis siendo la celda de electrolizador de óxido sólido (SOEC) y la electrólisis de membrana de intercambio aniónico (AEM) los dos más novedosos.

La SOEC se caracteriza por operar con vapor de agua a altas presiones y temperaturas (500-850 °C), mientras que la tecnología AEM emplea membranas de intercambio aniónico

compuestas por polímeros con conductividad iónica, en lugar de diafragmas de amianto. No obstante, debido a que ambos métodos no están desarrollados a nivel industrial su implementación queda descartada en una planta de la magnitud que se está desarrollando.

Los otros dos métodos que pueden ser empleados en una planta de gran escala son la electrólisis de membrana polimérica protónica (PEM) y la electrólisis alcalina (AWE). En el caso de la tecnología PEM, los protones atraviesan una membrana conductora hacia el cátodo, donde se combinan con los electrones para formar hidrógeno. Por su parte, la AWE utiliza una solución alcalina (KOH o NaOH) como electrolito y los iones hidroxilo se transfieren, bajo la influencia del circuito eléctrico, entre el ánodo y el cátodo a través de un diafragma poroso (Shiva Kumar y Himabindu 2019).

Entre las dos opciones, se optado por la tecnología AWE que ha sido la más utilizada para la electrólisis del agua en aplicaciones industriales a gran escala, desde 1920. Esto se debe a que los sistemas AWE son más fáciles de conseguir, más duraderos y presentan un coste de capital relativamente bajo.

Haciendo una comparación final entre los dos métodos principales mencionados anteriormente, se llega a la conclusión de que, si bien la electrólisis tiene un coste en energía muy elevado, la inversión que se necesita realizar es extremadamente pequeña en comparación a la necesaria para el reformado y si es posible asegurar una fuente de energía renovable que permita sustentar el proceso sin la necesidad de comprar la energía en el mercado esta alternativa sería la más económica y sostenible.

1.4. EL OXÍGENO

El oxígeno puro es un gas incoloro e inodoro y altamente reactivo. Se trata del elemento más abundante en la superficie de la tierra, aunque normalmente se encuentra combinado con otras especies químicas formando compuestos como el agua, sulfato o carbonatos; además está presente en el aire en forma gaseosa (Tegeder 1967).

Es un gas esencial para la vida, ya que es el oxidante casi universal usado por vivos para realizar procesos de respiración. A nivel industrial también posee una relevancia sustancial, siendo utilizado en combustiones, soldaduras o como reactivo en la síntesis de otros compuestos químicos. Según la pureza de oxígeno, se comercializan distintos grados.

En la Tabla II se recogen algunos de los usos más frecuentes para dicho gas, así como su grado de pureza.

Tabla II. Clasificación de los distintos tipos de oxígeno según su pureza (Sensor One Stop 2024)

Clasificación	Pureza en oxígeno (%)	Usos comunes
Oxígeno grado semiconductor (5.0)	99.999	Fabricación de semiconductores y producción electrónica
Oxígeno grado médico	99.5	Hospitales, asistencia sanitaria y terapias respiratorias
Oxígeno de grado industrial	99.2 – 99.5	Soldadura, cortes de metales y procesos industriales
Oxígeno grado técnico	98 – 99	Uso industrial general, tratamiento de aguas residuales

Cabe destacar que el oxígeno de grado médico no solo debe contener una elevada pureza, sino que además es necesario un control estricto sobre los contaminantes que podrían resultar perjudiciales para la salud de las personas, tales como la humedad, las partículas o los hidrocarburos.

2. OBJETO

Con más de 100 años de historia, el proceso de obtención de amoníaco goza de un elevado grado de madurez tecnológica, por lo que *a priori* se podría pensar que es poco susceptible a sufrir mejoras. Sin embargo, presenta un gran inconveniente dado el panorama político actual; se estima que el proceso Haber-Bosch es el culpable del 1,8 % de las emisiones de dióxido de carbono a nivel mundial (Bora et al. 2024), ya que tradicionalmente el hidrógeno utilizado se extrae de materias primas fósiles. Los procesos más comunes son el reformado de metano y la gasificación de carbones.

Tratados como el Acuerdo de París establecen que, para reducir los riesgos del cambio climático, es necesario mantener el aumento de temperatura mundial por debajo de los 2°C; para ello es esencial reducir las emisiones de gases de efecto invernadero (Naciones Unidas 2015).

Por tanto, el objeto del presente trabajo es diseñar una planta de fabricación de amoniaco verde de 116 000 toneladas anuales de capacidad; parte de la producción será destinada a la fabricación de fertilizantes y otra parte será comercializada como vector energético para energía almacenada en forma de amoniaco. El proceso está basado en la electrólisis del agua para la obtención de hidrógeno, mientras que el nitrógeno se extraerá del aire mediante destilación criogénica.

Complementariamente, se producirá gran cantidad de oxígeno de elevada pureza como subproducto. La composición exacta del mismo varía entre secciones del proceso, pudiendo ser comercializado como oxígeno para uso industrial o para uso medicinal, previo tratamiento de purificación.

El proyecto encaja con las líneas de acción establecidas por la hoja de ruta (MITECO 2020) del Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico (MITECO), que busca que España alcance la neutralidad climática alrededor del año 2050 mediante el desarrollo del hidrógeno verde.

3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

3.1. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA

Los siguientes criterios se consideran esenciales para la localización de la planta de producción de amoníaco verde:

- 1- **Disponibilidad de las materias primas.** Se plantea obtener el hidrógeno a partir de electrólisis del agua; por tanto, la disponibilidad de la misma en la región debe ser amplia.
- 2- **Disponibilidad de energías renovables para alimentar al proceso.** El proceso tendrá un consumo eléctrico considerable, el cual debe proceder en su totalidad de energías renovables; de lo contrario no podría considerarse como un proceso *verde*.
- 3- **Existencia de una planta de fabricación de fertilizantes.** Ya que la principal salida del amoníaco en el mercado es la fabricación de fertilizantes.
- 4- **Salida a puerto.** Hoy día se está explorando el potencial del amoníaco como combustible, en particular para buques, y como sistema de almacenamiento químico del hidrógeno. Por tanto, resulta esencial localizar la planta en un lugar con posibilidad de comercio marítimo con países extranjeros

Actualmente en España solo existen dos lugares que cumplan todos los requisitos: el Principado de Asturias y la provincia de Huelva. Para que la selección del emplazamiento sea óptima se compararán las características de ambas localizaciones; aquella que cuente con mayores ventajas se le asignará un punto, de manera que aquella con mayor puntuación será elegida. Los resultados se resumen en la Tabla III.

- (1) Ambas localizaciones cuentan con recursos fluviales de los cuales extraer agua. Sin embargo, Huelva cuenta con precipitaciones significativamente menores que Asturias; además, a causa del cambio climático se prevé un significativo descenso de las mismas en la provincia onubense (Agencia Estatal de Meteorología 2024). Por tanto, se le asignará un punto a Asturias para la categoría de “Disponibilidad de materias primas”.
- (2) Huelva es, a día de hoy, la provincia peninsular española con mayor número de horas de sol al año (Agencia Estatal de Meteorología 2024). Por tanto, se le asignará a Huelva un punto en la categoría de “Disponibilidad de energías renovables”.
- (3) Tanto el polígono industrial de Huelva como Asturias cuentan con una planta de fabricación de fertilizantes de la compañía *Fertiberia*. Por tanto, se les asignará un punto a sendas localizaciones en la categoría de “Existencia de una planta de fabricación de fertilizantes”.

- (4) Ambas localidades lindan con el mar. Además, cuentan con buenas infraestructuras portuarias; Huelva cuenta con el puerto de Huelva, y Asturias cuenta con los puertos de Gijón y Avilés. Sin embargo, con la expectativa de realizar comercio con el norte de Europa, Asturias cuenta con una mayor cercanía. Actualmente la empresa *ACE Terminal* está desarrollando en Rotterdam una terminal de recepción de amoniaco, tano para su utilización directa como o para su utilización como vector del hidrógeno verde («ACE Terminal») (Ver Figura 3). Por tanto, se le asignará un punto a Asturias en la categoría de “Salida a Puerto”.

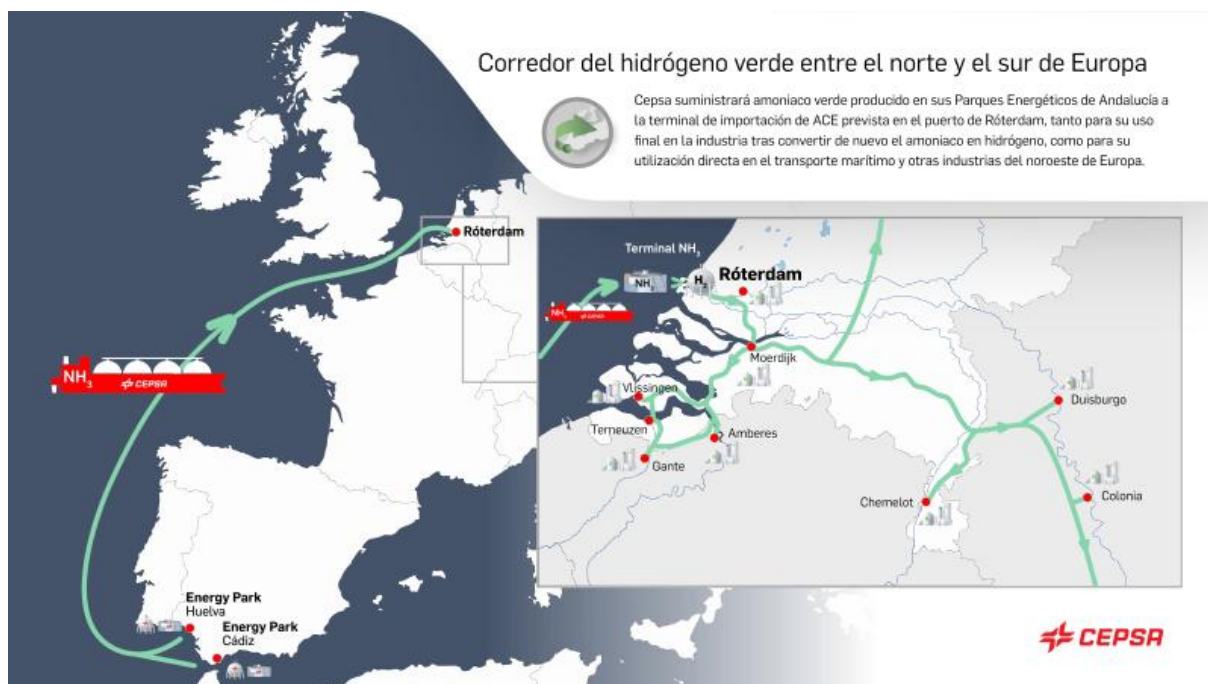


Fig. 3. Acuerdo entre las compañías *Cepsa* y *ACE Terminal* para la comercialización de amoniaco verde. Asturias presenta una ubicación ventajosa con respecto a Huelva y Cádiz, ya que se encuentra más cerca del punto de recepción (Benito 2023).

Tabla III. Valoración numérica de los distintos criterios para la selección de la localización de la planta.

Factores	Huelva	Asturias
(1) Disponibilidad de materias primas	0	1
(2) Disponibilidad de energías renovables	1	0
(3) Cercanía a una planta de fabricación de fertilizantes	1	1
(4) Salida a Puerto	0	1
TOTAL	2	3

Como se puede observar, ambas localizaciones tienen gran potencial. Sin embargo, Asturias ha recibido una valoración ligeramente superior, así que ese será el emplazamiento de la planta.

Dada la cercanía al puerto y a la planta de Fertiberia Avilés, el Polígono Industrial de la Ría de Avilés sería una localización ideal para emplazar el presente proyecto. Sin embargo, dicho polígono ya presenta un elevado grado de ocupación; no existen parcelas industrialmente disponibles para la compra y, en caso de existir, el precio sería probablemente muy elevado.

Por otro lado, en el presente momento está en marcha el proyecto de construcción de fabricación del Polígono Industrial Zalia, en el concejo de Gijón. El proceso de preventa finaliza el 30 de junio de 2025, por lo que en el momento de la realización del presente proyecto todas las parcelas están disponibles. Se ha escogido la parcela Q3 al ser la de mayor extensión; cuenta con una superficie total de casi 38 000 metros cuadrados, siendo la ocupación máxima de aproximadamente 28 500 metros cuadrados (un 75% del total). Además, al estar el polígono totalmente vacío, existe la posibilidad de poder ampliar el proyecto mediante la compra de parcelas adyacentes. En la Figura 4 se muestra la localización de la parcela en el polígono, así como el plano de la misma. («Zalia»)

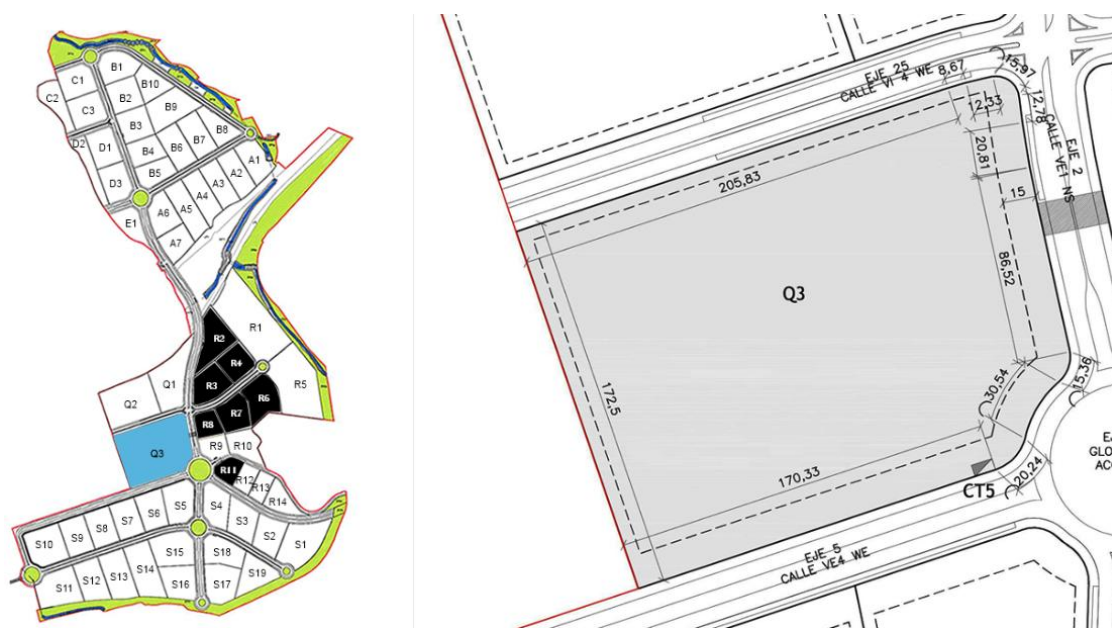


Fig. 4. Planos de la parcela industrial seleccionada.

Desde el polígono industrial de Zalia hasta los distintos puntos de interés hay una distancia por carretera muy razonable: hasta la planta de Fertiberia Avilés hay 18 kilómetros, hasta el puerto de Avilés hay 21.3 kilómetros y hasta el puerto de Gijón hay 11.6 kilómetros. Además, la línea de tren atraviesa el polígono, por lo que existiría la posibilidad de hacer transporte de mercancía por ferrocarril. Finalmente, cabe mencionar que hay apenas 3 kilómetros de distancia (en línea recta) hasta la planta de Arcelor Mittal, por lo sería posible suministrarle oxígeno de forma directa mediante gaseoductos.

3.2. POTENCIAL ECONÓMICO Y TAMAÑO DE LA PLANTA

Para comprobar si es posible llevar a cabo el proyecto en la situación actual, es fundamental estudiar la demanda o el consumo tanto de materias primas, como de amoníaco, así como, el precio de venta de este para estimar los posibles beneficios.

3.2.1. Estudio sobre el mercado

3.2.1.1. Consumo de hidrógeno y emisiones derivadas de su obtención

Actualmente, el consumo de hidrógeno en España se sitúa en torno a las 500 000 t/año. La mayoría es hidrógeno gris, cuya tasa de empleo en las refinerías es en torno al 70% y en fabricantes de productos químicos (amoníaco entre otros) del 25% (Sitio web del Hidrógeno).

Por otro lado, según datos nacionales de 2017, la producción de CO₂ asociada a la producción del hidrógeno para síntesis de amoníaco gris fue de 324.78 kt (MITECO, 2019).

3.2.1.2. Producción en España de amoníaco

En el año 2013 existían 3 fábricas de producción de amoníaco, cuya capacidad conjunta alcanzaba las 609 kt, lo cual representaba un 3 % de la producción europea total (Christian y Lorna, 2014).

Fertiberia dispone en Palos de la Frontera (Huelva) de una planta con una capacidad de producción de 400 kt/año. Por otro lado, en Puertollano (Ciudad Real) tiene otra planta que produce 219 kt/año.

La Asociación Española del Amoníaco Renovable (AEAR) está tratando de fomentar la sustitución del amoníaco gris por el verde. A nivel mundial, de media se producen 185 mt de amoníaco, contribuyendo en un 1% en las emisiones de gases de efecto invernadero. Se calcula que un 70% de este se destina a la obtención de fertilizantes. The Energy Transitions Commission prevé que para el año 2050, se necesitarán 24 millones de toneladas más para síntesis de compuestos químicos y 44 Mt adicionales para fertilizantes. (Aragón, 2023)

3.2.1.3. Coste del amoniaco en el mercado

En Europa, el coste del amoniaco tiene un valor de 0.66 \$/kg, siendo superior al del resto de países estudiados. («Ammonia price index - businessanalytiq» 2025)

Se estima que el aumento de la demanda incrementa la capacidad de producción mundial de amoniaco hasta casi los 290 millones de toneladas métricas, para el año 2030, desarrollándose nuevas plantas, fundamentalmente, en Asia y Oriente Medio. Se prevé que esto va a provocar un crecimiento del valor de amoniaco en el mercado en los próximos años como se puede ver en la Figura 5.

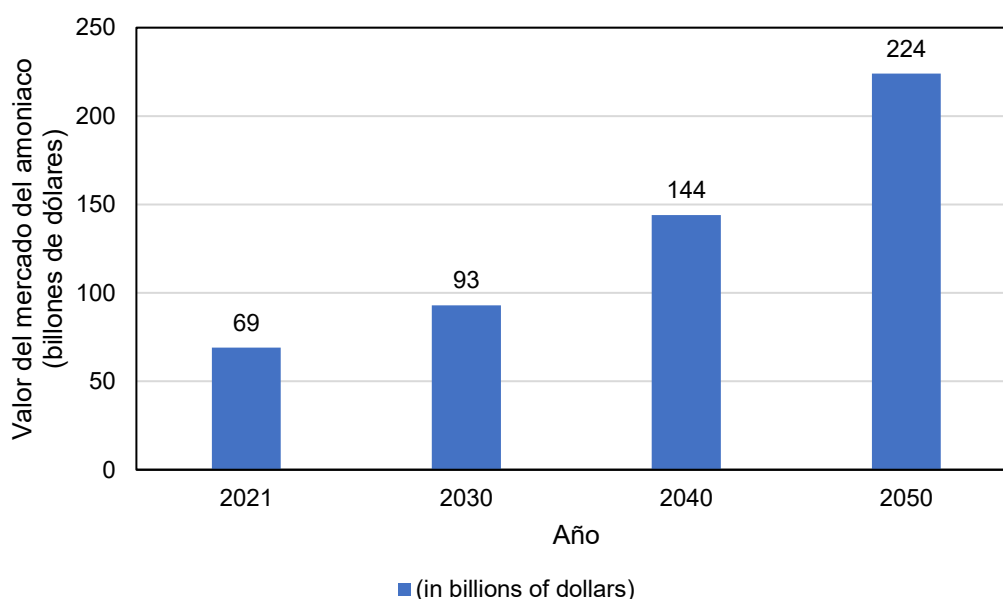


Fig. 5. Evolución estimada del valor en el mercado del amoniaco hasta el año 2050.

Como se observa en la Figura 5, su valor para el año 2050 puede llegar a superar el triple del actual, al ir aumentando la demanda de este producto. A pesar de que actualmente, la producción de amoniaco gris es más económica que la del verde, la creciente demanda influenciada por la deriva hacia la transición ecológica, van a provocar, previsiblemente, que la fabricación de amoniaco renovable sea competitiva, aumentando tanto su viabilidad como rentabilidad (Bora et al., 2024).

El coste de producción del amoniaco verde se calcula que es aproximadamente cuatro veces superior al gris. Aunque, se ve sujeto a cambios en factores como el precio de la electricidad o disponibilidad de las energías renovables, al igual que le sucede al gris, que depende del gas natural o impuestos derivados de las regulaciones ambientales, entre otros. («Green Ammonia Market Size, Share, Analysis & Forecast 2032», 2024)

3.2.1.4. Pureza del amoníaco que se vende en el mercado

Actualmente, amoníaco con diferentes grados de pureza tiene salida en el mercado, en función del uso que se le vaya a dar. Así se puede hablar («A Fuel Standard for Ammonia» 2020) de:

- Amoníaco premium (metalúrgico, Grado Met) con una pureza del 99,995 %
- Amoníaco de refrigeración (grado R) con una pureza del 99,98 %,
- Amoníaco comercial o agrícola (grado C) con una pureza del 99,5 %
- Amoníaco como combustible (se estima que la pureza sería de grado C o inferior)

La compañía Air Liquide comercializa en España amoníaco de distintos grados de pureza para distintos propósitos. La pureza, en general, supera el 99 % en amoníaco. («Amoníaco NH₃ | Air Liquide España - Gases industriales» 2024)

3.2.2. Estimación de ingresos por ventas

La planta produce dos compuestos: amoníaco y oxígeno. En la Tabla IV se muestran los valores de producción y la pureza de las distintas corrientes. Ambos se consideran productos químicos básicos, y su precio en el mercado es fluctuante. En el caso del amoníaco, el precio depende del precio de las materias primas, como son el gas natural (en el caso del amoníaco gris y el azul), o la electricidad (como en el caso del amoníaco verde).

El precio del amoníaco gris se encuentra típicamente entre los 500 y los 750 \$/t métrica (ICIS 2016), aunque en regiones donde hay escasez o abundancia de gas natural puede llegar a 1000 \$/t o 200 \$/t respectivamente. El amoníaco verde puede llegar a ser hasta 4 veces más caro que el amoníaco gris, pero en mayo de 2025 tenía un precio que ronda los 850 \$/t, según páginas de internet consultadas (Live 2024).

Tabla IV. Producción anual y pureza de los productos de la planta.

	t/año	Pureza (% v/v)
Producción de amoníaco	116038	99.99
Producción oxígeno (Secc. III)	174487	99.80
Producción oxígeno (Secc. II)	32314	95.81
Producción oxígeno (total)	206801	99.18

En el caso del oxígeno, su precio en el mercado depende en gran medida del grado de pureza y la presencia de impurezas (partículas, humedad o hidrocarburos). En la Tabla II se puede ver la pureza requerida para distintas aplicaciones; resulta evidente que, cuanto

mayor sea la pureza del oxígeno, mayor será su precio en el mercado. En la Sección III se obtiene una corriente de oxígeno con una pureza del 99.8%, mientras que en la Sección II el oxígeno producido tiene una pureza del 95.81%.

Al tener dos corrientes con purezas de oxígeno muy diferente, las posibilidades de mercado son muy amplias. Para simplificar, se van a estudiar dos alternativas:

1. Las dos corrientes de oxígeno se mezclan y se vende todo como oxígeno de uso industrial.
2. La mitad de la producción de oxígeno de la sección III es vendido como oxígeno grado médico. La otra mitad se mezcla con la corriente de la sección II y se vende como oxígeno de grado técnico.

Cabe mencionar que el oxígeno producido en la sección III, tiene un porcentaje de humedad del 0.17% en volumen, lo cual equivale a 1700 ppm. El oxígeno medicinal marca Linde tiene una concentración de oxígeno de menos de 67 ppm; por tanto, en la realidad, el oxígeno producido no es apto para su comercialización como medicamento. Sería necesario invertir en un sistema de secado de la corriente de oxígeno, por ejemplo, una torre de adsorción con zeolitas.

Por otro lado, el precio del oxígeno también depende en gran medida del modo de comercialización. Si se realiza una venta al por mayor el precio por tonelada sería bastante inferior al precio por su comercialización en forma de botellas al por menor. Resulta evidente que la venta al por menor conllevaría una mayor inversión en cuestión de logística y personal para gestionar las ventas, por lo que es poco frecuente que las plantas químicas realicen este tipo de ventas.

3.2.2.1. *Alternativa 1*

El precio del oxígeno de uso industrial a nivel mundial en este momento se encuentra entre 325 \$/t (en Francia) y 505 \$/t (en Canadá), según datos consultados en internet (imar 2025). La pureza de oxígeno no es particularmente elevada, y contiene bastante humedad, así que se le va a asignar un valor de 325 \$/t. Por otro lado, al amoníaco se le va a asignar un precio de 810 \$/t, un poco inferior al precio actual del amoníaco verde para competir en el mercado. Para considerar los ingresos en € se va a aplicar el cambio de que 1 \$ equivale a 0.87 € (más detalles acerca de esta conversión en el apartado I.5.1 de la Sección I). En la Tabla V se muestra la estimación de ingresos por ventas

Tabla V. Estimación de ingresos por ventas según la alternativa 1

	t/año	Pureza (% v/v)	Precio (€/t)	Ingresos (M€/año)
Amoniaco	116 038	99.99	704.7	81.77
Oxígeno industrial	206 801	99.18%	282.8	58.47
TOTAL	322 839	-	-	144.28

3.2.2.2. Alternativa 2

El precio del oxígeno de grado médico también varía mucho, y depende de la región. Se va a utilizar como referencia el precio de la botella de oxígeno medicinal de 50 L de la página Quantum Spain. El precio base de la botella vacía es de 939 €, y el de la botella cargada de 1079 €; actualmente tienen un descuento del 30%, de tal manera que los precios son 719 y 749 € respectivamente. Esto da un precio por recarga de entre 140 y 30 €. La botella tiene capacidad para albergar 10.6 m³ en condiciones normales (1 atm, 20 °C), lo cual equivale a 14.1 kg de oxígeno. Por tanto, se puede decir que el precio del oxígeno medicinal puede variar entre 2130 y 9930 €/t cuando se compra al por menor. La venta al por mayor supone no más de un 30% del precio de venta al por menor, lo cual situaría el precio de venta al por mayor de oxígeno medicinal entre 639 y 2979 \$/t (Quantum Spain 2025).

Al mezclar la mitad del oxígeno producido en la Sección III con el de la Sección II se obtiene una pureza del 98.72%, lo cual es suficiente para considerarlo de grado técnico. No se cuenta con información acerca de la variación del precio del oxígeno según su pureza, así que se le va a aplicar una rebaja arbitraria al precio de venta del oxígeno de grado técnico. Para ser conservadores, se va a considerar un precio de venta de 639 €/t para el oxígeno medicinal, y de 290 €/t para el oxígeno grado técnico (una rebaja de aproximadamente 17% respecto a la alternativa 1). En la Tabla VI se muestra la estimación económica.

Tabla VI. Estimación de ingresos por ventas según la alternativa 2.

	t/año	Pureza (% v/v)	Precio (€/t)	Ingresos (M€/año)
Amoniaco	116 038	99.99	704.7	81.77
Oxígeno medicinal	87 244	0.9980	555.9	48.50
Oxígeno Industrial	119 557	0.9872	252.3	30.16
TOTAL	322 839	-	-	160.44

Comparando los resultados de las dos alternativas, se puede observar que la alternativa 2 permite ingresos ligeramente superiores. Sin embargo, cabe recordar que esta alternativa supone también una inversión adicional para eliminar el agua de la corriente de oxígeno. Además, requiere un estudio de mercado para conocer la demanda de oxígeno medicinal y comprobar si esta venta es posible.

3.3. PLANTEAMIENTO

El objetivo de esta planta es la fabricación de amoníaco de manera sostenible, siendo uno de los puntos clave la sustitución del reformado de gas natural por la electrólisis del agua. Sin embargo, para poder considerar al proceso “verde”, es necesario que esa energía proceda de fuentes renovables; de poco serviría el cambio si la electricidad con que se alimenta al proceso proviniera de la quema de combustibles fósiles.

Algunas de las plantas existentes buscan el autoabastecimiento de electricidad verde mediante la instalación de paneles solares. Sin embargo, dadas las características del clima de Asturias, no resulta realista alimentar el proceso entero únicamente con energía solar. En la Figura 6 se observa que el número de horas de sol en Asturias es pequeño en comparación con otras regiones.

Por tanto, una mejor alternativa para la región de Asturias es combinar la instalación de paneles fotovoltaicos (por ejemplo, sobre los techos de los edificios de la planta) con la de aerogeneradores de pequeño tamaño para el aprovechamiento de las brisas marinas que azotan las costas asturianas de manera casi permanente. Dado el elevado consumo eléctrico de la planta, el autoabastecimiento total no es realista, pero la instalación de sistemas de generación puede ser un buen complemento.

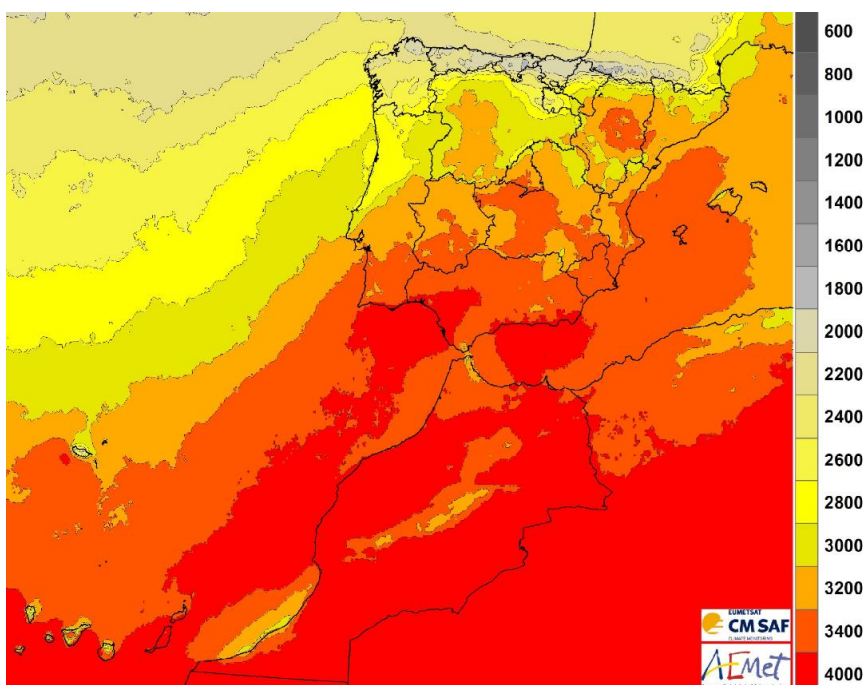


Fig. 6. Mapa de España y el norte de África donde se representa por colores el número anual de horas de sol, la leyenda cromática muestra la equivalencia en horas/año. Elaborado en 2023 (Agencia Estatal de Meteorología 2024).

La planta consta de 5 secciones, cada una de ellas con distintas características y equipos, pero todas imprescindibles para la síntesis del amoníaco. Estas son:

- Sección I. Pretratamiento del aire
- Sección II. Destilación criogénica
- Sección III. Hidrólisis del agua
- Sección IV. Reactor de síntesis
- Sección V. Purificación de amoniaco

3.3.1. Sección I. Pretratamiento del aire

Esta sección consiste en la limpieza y purificación de la corriente de aire de entrada para evitar que las impurezas sean arrastradas a etapas posteriores del proceso, ya que esto podría causar graves problemas en equipos posteriores. También se debe comprimir el aire hasta una presión suficiente para realizar la destilación criogénica.

3.3.1.1. Eliminación de contaminantes sólidos

En primer lugar, para evitar problemas en los compresores es necesario eliminar las partículas de tamaño superior a las 10 micras; partículas más pequeñas no suelen tener energía cinética suficiente como para causar daño estructural en los álabes de los compresores (Alqallaf et al. 2020). Partículas de tal tamaño no se consideran como dañinas para la salud, ya que son fácilmente detectables a simple vista y sedimentan rápidamente, por lo que no son analizadas en los estudios de calidad del aire. Sin embargo, se estudian las posibles alternativas en caso de que en futuros estudios de campo se detectase una concentración significativa de las mismas:

- **Una cámara de separación.** Sencillo, barato y fácil de operar. Consiste en realizar un ensanchamiento en la conducción del aire, de tal manera que la velocidad axial del aire a través de esta se reduzca. Los sólidos, atraídos por la fuerza de la gravedad, describirán una trayectoria descendente y se depositarán en el fondo de la conducción. El mayor inconveniente es que ocupan un gran volumen.
- **Ciclones.** Imprime a la corriente de aire un movimiento curvo, aprovechando la fuerza centrífuga para la eliminación de partículas. Es sencillo, pero produce grandes caídas de presión que encarecería mucho los costes de operación
- **Separadores inerciales.** Consiste en introducir obstáculos en la línea de flujo del aire; las partículas sólidas impactarán sobre los obstáculos y se precipitarán hacia

el fondo del recipiente. Al igual que la cámara de sedimentación es sencillo y barato, aunque pueden generarse problemas de abrasión sobre los obstáculos.

Dadas las tres alternativas se ha **considerado que la mejor opción es utilizar un separador inercial**, ya que es sencillo, barato de operar y tiene un menor tamaño que las cámaras de sedimentación.

Las partículas de menos de 10 micras, pese a que no dañen los compresores, también deben ser eliminadas porque que con el tiempo podrían llegar a causar problemas de atascamiento en los lechos de adsorción. Para la eliminación de partículas de pequeño tamaño existen tres alternativas:

- **Filtro de tela.** Consiste en hacer pasar el aire con partículas a través de un medio filtrante de tela (algodón, lana, fibras sintéticas...) o fibra de vidrio, de tal forma que las partículas sólidas quedan retenidas sobre la superficie de la tela.
- **Lavado de gases.** Se pulveriza agua sobre la corriente gaseosa, permitiendo eliminar partículas de hasta 0.001 micras y contaminantes homogéneos. Por el fondo del equipo, se recogen los contaminantes en forma de lodo. Además, tiene pérdidas de carga elevadas
- **Precipitador electrostático.** Consiste en una serie de cámaras que tienen en su interior filamentos y placas metálicas a través de las cuales pasa la corriente. El campo magnético que genera es capaz de atraer las partículas sólidas, que impactan contra los electrodos y precipitan, siendo recogidas por la parte inferior del equipo. Suponen un elevado consumo energético.

Dadas las características de los distintos equipos, se ha determinado **que la mejor opción para el presente proyecto es el filtro de tela**. El lavado de gases y el precipitador electrostáticos son equipos mucho más complejos y caros de operar; además, suelen ser utilizados para la limpieza de gases con una elevada concentración de partículas.

3.3.1.2. *Equipos para la eliminación de contaminantes homogéneos*

Otros contaminantes que deben ser eliminados para evitar que causen problemas de funcionamiento en la torre de destilación figuran en la Tabla VII. Hay que prestar especial atención a:

- El **vapor de agua** y el **dióxido de carbono**, pues su temperatura de congelación es superior a la temperatura de operación de la columna, lo cual puede provocar que cristalicen y obstruyan el proceso. La máxima concentración recomendada de los mismos son 0.1 ppm y 1 ppm respectivamente (Rege, Yang y Buzanowski 2000).

- El **acetileno** ya que tiende a formar cristales y a acumularse el calderín, lo cual supone un riesgo de explosión. La máxima concentración de acetileno recomendada es de 0.5 ppm (Singla y Chowdhury 2019).

Tabla VII. Concentración máxima de contaminantes que pueden entrar a la doble columna Linde (Kumar et al. 2003).

	PPMv
Dióxido de nitrógeno (N ₂ O)	0.09
Dióxido de carbono (CO ₂)	1
Agua (H ₂ O)	0.1
Metano (CH ₄)	Indefinido
Etano (C ₂ H ₆)	0.25
Propano (C ₃ H ₈)	0.1
Acetileno (C ₂ H ₂)	0.0005
Etileno (C ₂ H ₄)	0.2
Propileno (C ₃ H ₆)	0.035
Hidrocarburos de más de 4 carbonos	0.005

Para la eliminación de la mayoría de los contaminantes homogéneos se utilizan sistemas de adsorción, que normalmente trabajan a presión elevada y temperatura baja. En las condiciones de trabajo de las columnas de adsorción es de esperarse que gran parte de la humedad ambiental condense. Se desea evitar que el lecho se empape, ya que esto podría alterar las propiedades de los adsorbentes e impedir que funcionen adecuadamente, así que es necesario incluir un separador de fases antes del lecho del equipo de adsorción.

Se han considerado dos procesos para llevar a cabo la eliminación de contaminantes homogéneos:

- **Una adsorción por oscilación de temperatura (TSA).** Para la regeneración del lecho, se despresuriza el lecho mediante un venteo a la atmósfera; a continuación, se hace pasar una corriente caliente de aire libre de impurezas.
- **Una adsorción por oscilación de presión (PSA).** Para la regeneración del lecho, primero se realiza un venteo a la atmósfera, tras lo cual se la somete a una presión inferior a una temperatura similar a la atmosférica para terminar de desorber los contaminantes.

Como se puede observar en la Tabla VIII, cada uno de los métodos tiene sus propias ventajas y desventajas; sin embargo, la TSA resulta la más adecuada para la purificación de aire dadas las características del presente proceso. Pese a que la producción de oxígeno de la planta dista de ser “muy grande”, la estabilidad de flujo y, en particular, las menores pérdidas suponen ventajas significativas; resultaría contradictorio desperdiciar un 40 % de la producción de aire limpio en un proceso que pretende ser “verde”.

Tabla VIII. Ventajas y desventajas de los métodos PSA y TSA para la eliminación de contaminantes gaseosos antes de la destilación criogénica (Zhang, Wang y Wang 2024; Kumar et al. 2003).

	PSA	TSA
Costes	Resulta más barata para cantidades moderadas de producción.	Supone mayores costes para plantas de capacidad moderada. Es idónea para producciones muy grandes de oxígeno
Energía	En general, su consumo de energía total es menor.	Requiere energía térmica, por lo que puede resultar más cara a menos que se cuente con una fuente de calor económica
Tiempo de ciclo	Ciclos cortos, del orden de minutos	Ciclos más largos, del orden de horas.
Gas de purga	Supone un 40 % del gas de alimentación. Esto se debe a los ciclos cortos y a las grandes pérdidas por venteo y despresurización	Suponen un 10 % del gas de alimentación
Flujo de producto	Durante los procesos de presurización se pueden producir irregularidades en el flujo de alimentación a la doble columna.	Tiende a tener un flujo de producto más constante durante la fase de adsorción debido a los ciclos más largos.

3.3.2. Sección II. Destilación criogénica

Para describir adecuadamente el proceso, se debe dividir en dos partes principales, la sección de licuefacción y la sección de destilación

3.3.2.1. Sección de licuefacción

En esta sección se busca obtener una fracción líquida del gas a separar mediante sistemas de compresión, enfriamiento y expansión. Para ello, se han considerado 3 alternativas:

- **Sistema Linde-Hampson simple:** Es el segundo sistema de licuefacción desarrollado industrialmente y a pesar de ello el más simple. Consiste en una compresión isoterma, seguida de un enfriamiento isobaro y finalmente una expansión isoentálpica.
- **Sistema Linde-Hampson con preenfriamiento:** La diferencia respecto al sistema anteriormente descrito, es la aplicación de una refrigeración anterior al

intercambiador de calor principal para que entre al mismo a una temperatura inferior a la ambiente, mejorando el rendimiento del proceso.

- **Sistema Claude:** En este sistema se aplica igualmente una compresión isoterma, sin embargo, la corriente comprimida pasa por varios intercambiadores de calor entre los cuales se realiza un fraccionamiento de la corriente y se hace pasar por una turbina de expansión. Aun así, la fracción no expandida en la turbina se debe hacer pasar por una válvula de expansión isoentálpica ya que la turbina no permite que la corriente se enfríe lo suficiente como para que licue.

De estos tres métodos, se ha escogido una variante simplificada del sistema Linde-Hampson con preenfriamiento, en la que se prescindirá de recircular la fase de vapor. Optando por introducir la mezcla líquido-gas en la columna directamente. Ya que simplifica en gran medida la termodinámica del sistema a la vez que es una buena forma de promover un perfil térmico más realista en la torre, permitiendo un mejor arranque del equilibrio líquido-vapor (Kister, 1992).

3.3.2.2. Sección de destilación

En esta sección se llevará a cabo la separación principal del gas deseado. Para el sistema de separación, se han considerado los siguientes sistemas:

- **Columna Linde simple:** Este sistema se creó y utilizó principalmente para la obtención de oxígeno de muy alta pureza, sin embargo, el nitrógeno resultante de la separación sale de la columna con purezas bastante bajas (90%) por lo que no se considerará su aplicación en este proyecto.
- **Doble columna Linde:** La solución ingenieril al principal problema de la columna Linde simple es añadirle una sección de enriquecimiento, sin embargo, se plantea un gran problema energético puesto que la condensación del nitrógeno tiene requerimientos energéticos exorbitantes. Por ello se diseñó un sistema en el que se integran dos columnas de destilación, una de alta presión y otra de baja. La columna de alta presión realiza la separación inicial del nitrógeno y en el fondo de esta, se utiliza el calor latente de evaporación del oxígeno para enfriar la corriente de alimentación. En la parte superior se encuentra un condensador acoplado al calderín de la columna de baja presión, la diferencia de presión entre ambas columnas permite el intercambio de calor entre ambas secciones. El nitrógeno y el oxígeno en estado líquido se expandirán para generar frío y se introducen en la columna de baja presión, proporcionando el reflujo líquido necesario por la falta de condensador. Finalmente, las corrientes de salida de la columna se utilizan para realizar un preenfriamiento del aire de alimentación.

- **Sistema Linde-Frankl:** Este sistema se creó con el auge en la demanda de oxígeno y nitrógeno de alta pureza. El sistema se basa en la doble columna Linde y para el intercambio de calor se utilizan regeneradores Frankl, el sistema tiene una complejidad extremadamente alta, puesto que se deben diseñar una gran cantidad de regeneradores, más de una compresión, expansión en turbinas, sistemas de preenfriamiento con refrigerantes, válvulas de expansión e integración energética con el producto. Con todos estos ajustes se logró reducir la demanda energética original de la doble columna Linde a la mitad.

De estos modelos se ha optado por el de la doble columna Linde, ya que permite un rendimiento de operación satisfactorio sin tener una complejidad de diseño y optimización excesiva, lo que permite cierta flexibilidad a la hora de del diseño específico del sistema (Barron, 1999).

3.3.3. Sección III. Electrólisis del agua

La electrólisis es un proceso electroquímico que se conoce desde hace 200 años y es utilizado para la descomposición del agua en hidrógeno y oxígeno. A pesar de que tiene una ventaja muy significativa, como es producir hidrógeno de una pureza cercana al 100%, sus aplicaciones a nivel industrial siempre han estado limitadas por diversos factores.

Entre ellos está el factor económico, ya que durante la electrólisis se consume una gran cantidad de energía eléctrica que encarece significativamente el proceso. Esto hace que no se pudiera competir con el precio de otras tecnologías de producción de hidrógeno, como el reformado de vapor. Por lo tanto, no es de extrañar que el hidrógeno verde solo represente el 4%-5% de la producción mundial.

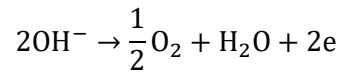
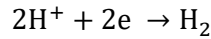
Sin embargo, el Acuerdo de París en 2015, ha cambiado el rumbo de la producción de hidrógeno. En él se estableció el objetivo de alcanzar cero emisiones netas de gases de efecto invernadero para la segunda mitad del siglo XXI. (Hou y Yang 2024)

Este acuerdo ha acelerado el desarrollo de las energías renovables que ha permitido abaratar el coste energético permitiendo que la electrólisis a nivel industrial sea más viable.

3.3.3.1. Fundamentos de la electrólisis

En la Figura 7, se muestra un esquema básico de los elementos principales de un sistema de electrólisis del agua. Entre ellos destaca el ánodo, el cátodo, la fuente de alimentación y un electrolito.

Para mantener el balance eléctrico se aplica la corriente continua haciendo que los electrones fluyan desde el terminal negativo de la fuente al cátodo. En el cátodo tendrá lugar la primera semirreacción donde se formará el hidrógeno. Por otro lado, en el ánodo se formará el oxígeno por medio de la segunda semirreacción.



Por lo tanto, la reacción global es la que tiene lugar en el electrolizador, y se muestra a continuación

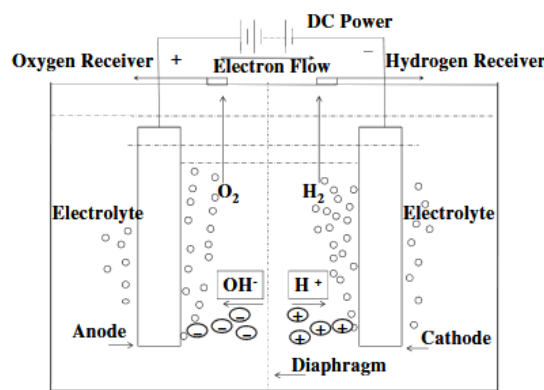
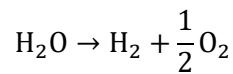


Fig. 7. Esquema del sistema de electrólisis del agua (Zeng y Zhang 2010)

El desplazamiento de los aniones (iones hidróxido) al ánodo mantiene el equilibrio de carga eléctrica y a su vez se liberan electrones que retornan al terminal positivo de la fuente continua cerrando así el circuito. Los electrolitos contienen iones de alta movilidad que permiten aumentar la conductividad de la disolución aumentando el rendimiento del proceso de electrólisis.

Entre el cátodo y el ánodo se encuentra el diafragma que consiste en una lámina delgada y porosa que funciona como una barrera de gases. Además, presenta varias características como una baja resistencia iónica, una alta resistencia mecánica y una alta estabilidad térmica.

Habitualmente está compuesto de sulfuros de polifenileno (PPS), material compuesto de zirconia (ZrO_2) y polisulfonas (PSU). Entre sus principales parámetros técnicos destaca un espesor de 500–1000 μm y una resistencia iónica de aproximadamente 0,1–0,3 $\Omega \text{ cm}^2$ (Hou y Yang 2024).

3.3.3.2. AWE

La producción de hidrógeno mediante electrólisis alcalina del agua es una tecnología bien establecida hasta el rango de megavatios para nivel comercial en todo el mundo (Shiva Kumar y Himabindu 2019).

El proceso de electrólisis que tiene lugar es el mismo que se menciona en el apartado 1.2. Sin embargo, en la electrólisis alcalina se opera a temperaturas bajas entre los 30–80 °C, empleando una disolución acuosa (KOH/NaOH) como electrolito, cuya concentración es del 20% al 30%.

En el proceso de electrólisis alcalina del agua, se utilizan diafragmas de asbesto y materiales de níquel como electrodos. Sin embargo, estos materiales provocan que estos electrolizadores presenten densidades de corriente limitadas, una baja presión de operación y una baja eficiencia energética como se mostraba en la Tabla I.

3.3.4. Sección IV. Sistema de reacción para la síntesis de amoníaco

En una planta de producción de amoníaco, el reactor de síntesis constituye el núcleo operativo de la planta. Su diseño y rendimiento influyen directamente en la eficiencia energética y económica del proceso global. El diseño de estos equipos requiere un equilibrio entre la eficiencia del catalizador, la transmisión de calor y la dinámica del flujo de los gases.

3.3.4.1. Configuraciones para el sistema de reacción

Existen diversas configuraciones para el sistema de reacción en la síntesis de amoníaco, siendo diferenciadas por el método de enfriamiento y la disposición del catalizador. Uno de los enfoques más comunes es el uso de convertidores con enfriamiento interno, en los cuales el calor de reacción se elimina mediante tubos ubicados dentro del lecho catalítico, los cuales pueden operar con flujo co-corriente o contracorriente (Max Appl 2012).

Otra alternativa frecuente es el de los reactores de múltiples lechos con enfriamiento intermedio. En este caso, el gas pasa por varios lechos catalíticos, y entre cada uno de ellos se disipa el calor generado. En la Figura 8 se muestra un ejemplo de esta configuración.

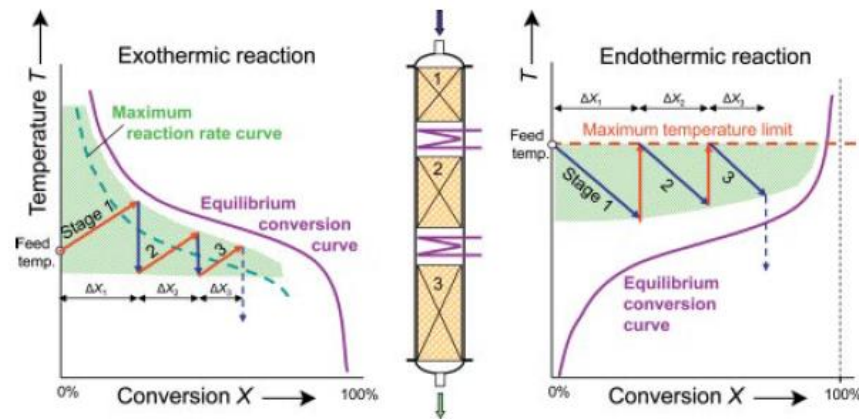


Fig. 8. Esquema de funcionamiento de un reactor de lecho fijo con etapas de refrigeración intermedia contracorriente (Max Appl 2012).

Esto puede lograrse mediante inyección directa de gas frío, un método sencillo desde el punto de vista mecánico y económico, aunque menos eficiente en cuanto al aprovechamiento del catalizador (Khademi y Sabbaghi 2017). También es posible usar sistemas de enfriamiento indirecto, a través de cambiadores de calor internos o externos al sistema, lo cual es característico de los diseños más recientes y avanzados (Max Appl 2012).

El patrón de flujo del gas dentro del convertidor es otro aspecto clave del diseño. Los flujos axiales, donde el gas fluye a lo largo del eje del reactor, es un sistema simple, pero generan una mayor caída de presión, lo que requiere partículas de catalizador de mayor tamaño para evitar obstrucciones. Por otro lado, el flujo radial permite el uso de partículas más pequeñas, lo que mejora la eficiencia de reacción y disminuye la caída de presión. Existen además configuraciones mixtas, como el flujo axial-radial, que combinan ambos modelos. En la Figura 9 se muestra un esquema de los dos modelos de flujo mencionados.

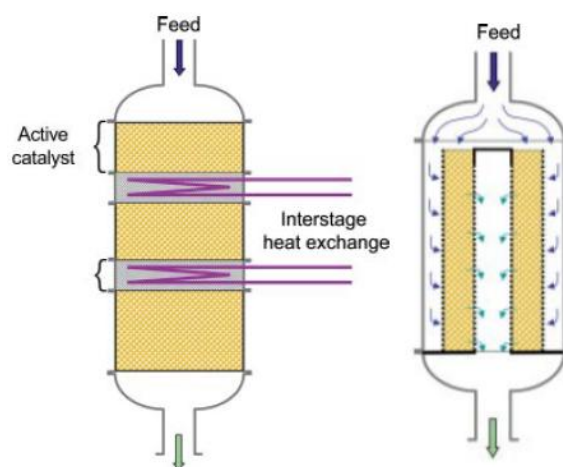


Fig. 9. Esquemas representativos de un sistema de flujo axial y un sistema de flujo radial (Eigenberger y Ruppel 2012).

La composición del gas es otro aspecto fundamental, la presencia de impurezas como metano, argón o helio actúan como inertes, reduciendo la conversión, mientras que compuestos que contienen oxígeno, tales como agua, monóxido y dióxido de carbono u oxígeno molecular, son venenos catalíticos incluso en concentraciones muy bajas.

El diseño estructural de los reactores incluye una carcasa de presión y una estructura interna que contiene los lechos catalíticos. Es habitual incluir cambiadores de calor en el integrados en la parte interior del reactor. Sin embargo, el uso de un sistema de enfriamiento externo permite reducir el estrés térmico sobre la carcasa, haciendo posible emplear aceros más económicos. El calor generado por la reacción se aprovecha generalmente para producir vapor de alta presión, contribuyendo a mejorar el balance energético de la planta (Max Appl 2012).

3.3.4.2. Catalizadores en la síntesis de amoníaco

En la síntesis de amoníaco el uso de catalizadores es un factor crucial para lograr suavizar las condiciones de operación y mejorar la eficacia del proceso. Los catalizadores de hierro, especialmente los basados en magnetita (Fe_3O_4), han sido tradicionalmente los de mayor implementación a nivel industrial. En la Figura 10 se muestran las distintas estructuras cristalinas para el óxido de hierro.

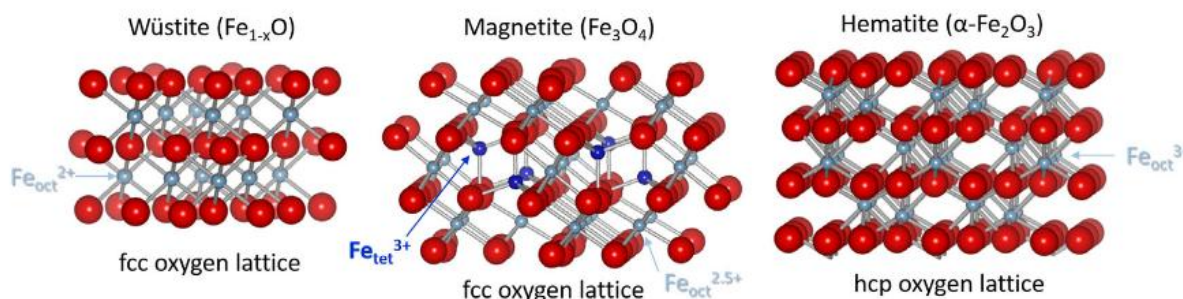


Fig. 10. Estructuras cristalinas de óxido de hierro (Humphreys, Lan y Tao 2021).

Durante la etapa de reducción, la magnetita se transforma en hierro metálico en su forma alfa, que es catalíticamente activa. Estos catalizadores están constituidos también por óxidos no reducibles como promotores (óxidos de aluminio, potasio y calcio) que optimizan la estabilidad térmica y la actividad del sistema.

El mecanismo de reacción de estos catalizadores se centra en la adsorción y disociación de nitrógeno en su superficie, lo cual constituye el paso limitante en la síntesis de amoníaco (D. Annable 1952).

Los promotores desempeñan un papel fundamental en la efectividad del catalizador, ya que optimizan tanto su estructura como su actividad química. Los promotores estructurales, como el óxido de aluminio, contribuyen a generar una gran superficie interna durante el

proceso de reducción y estabilizan el material frente a altas temperaturas. Actúan como separadores entre los cristalitas de hierro, impidiendo su crecimiento excesivo y evitando la sinterización. Por otro lado, los óxidos alcalinos aumentan la reactividad del hierro al favorecer la disociación de las moléculas de nitrógeno y disminuye la energía de adsorción del amoníaco, facilitando la desorción del amoníaco, lo que evita que se acumule y bloquee los sitios activos del catalizador.

3.3.5. Sección V. Separación y purificación del producto

La reacción de síntesis del amoníaco presenta una conversión por paso baja, próxima al 20%. Ante estos casos, es fundamental valorar la forma de obtener el producto final con la mayor pureza posible. En función de los componentes involucrados en la reacción, esto se realizará de un modo u otro. En este caso, el amoníaco formado, sale del reactor junto a los reactivos no reaccionados, así como argón y posibles trazas de oxígeno.

El hidrógeno, el nitrógeno y el argón, se consideran prácticamente incondensables con respecto al amoníaco, ya que, los diagramas de fases de estos muestran que existe una gran diferencia entre sus puntos de ebullición. Con el programa Aspen HYSYS se determinan, de una manera más precisa, las temperaturas de ebullición de los componentes de la mezcla puros a 200 atm, que es la presión a la que trabaja el reactor. Estas temperaturas se muestran en la Tabla IX.

Tabla IX. Puntos de ebullición de los componentes puros a 200 atm (Aspen HYSYS).

Componente puro	Temperatura de ebullición (°C)
Nitrógeno	-121
Hidrógeno	-240
Argón	-70
Amoníaco	152

En la Tabla IX se comprueba que, efectivamente, a elevada presión, la diferencia entre los puntos de ebullición de los compuestos se mantiene. Este hecho se aprovecha para seleccionar el método de separación del amoníaco, que, en este caso, consiste en la condensación. Al disminuir la temperatura de la corriente de salida del reactor, se alcanza el punto de ebullición del amoníaco y, por tanto, este pasa a estado líquido. Sin embargo, esta separación es compleja, ya que, el producto está en una cantidad mucho más pequeña que

los reactivos no reaccionados. Además, estos gases no condensables crean una película de gas que dificulta la transferencia, tanto de materia de una fase a otra, como de calor para dar lugar al cambio de fase. Es decir, la cantidad condensada de amoníaco va a ser pequeña respecto al total, por ello, se decide hacer dos ciclos de condensación para tratar de maximizar la producción.

Tras cada condensación se utilizará un separador gas-líquido, que permita obtener ambas fases de manera independiente. Esta operación depende únicamente de las propiedades de la mezcla, como la densidad, el equilibrio de fases, etc. Por ello, es complicado predeterminedir la eficiencia de esta separación, sin embargo, es la forma más sencilla y económica.

Los reactivos no reaccionados se mantienen en fase gas y se recirculan al reactor para así reutilizarlos y reducir costes y requerimientos de materias primas.

Por otro lado, el amoníaco líquido, junto con las impurezas restantes del proceso, se introduce en una columna de destilación para aumentar su pureza y con ella, las posibilidades de hacerse un hueco en el mercado.

3.4. DIAGRAMA DE BLOQUES SIMPLIFICADO

A continuación, se presenta en la Figura 11 el diagrama de bloques simplificado del proceso. El diagrama de flujo detallado aparece reflejado en la sección 5.

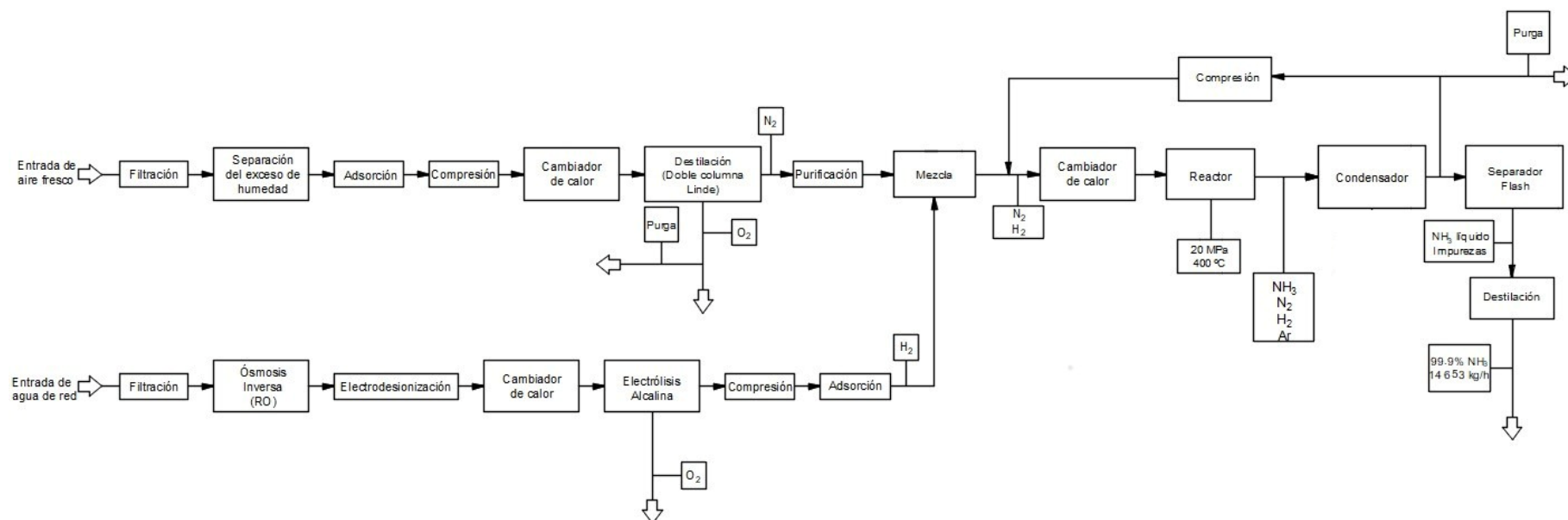


Fig. 11. Diagrama de bloques simplificado.

4. BALANCES DE MATERIA Y DE ENERGÍA

Tabla X. Balances de materia. Parte 1 (corrientes 1 a 12)

Flujo másico (kg/h)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	12
Nitrógeno	14 271	14 271	14 271	14 271	14 271	14 271	1 427	12 844	12 844	7 450
Hidrógeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Amoniaco	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Oxígeno	4 374	4 374	4 374	4 374	4 374	4 374	437	3 937	3 937	1
Argon	243	243	243	243	243	243	24	218	218	4
Agua	448	448	448	448	45	-	-	-	-	-
Dióxido de carbono	14	14	14	14	14	-	-	-	-	-
Sales	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cloro 10 ³	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sólidos 10 ⁴	15	15	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes 10 ⁴	2	2	2	2	2	-	-	-	-	-
TOTAL	19 350	19 350	19 350	19 350	18 947	18 888	1 889	16 999	16 999	7 455
T (°C)	15	15	15	15	15	15	15	15	15	-178.9
H (kJ/kg)	75.0	75.0	75.0	75.1	21.0	15.1	15.1	15.1	15.1	-391.3
P (kPa)	101.3	102.8	102.8	555	555	555	555	555	4 053	506.6

Tabla XI. Balances de materia. Parte 2 (corrientes 15 a 27)

Flujo másico (kg/h)	15	16	18	21	22	23	24	25	26	27
Nitrógeno	5 394	12 844	8 10 ⁻³	0	-	-	-	-	-	-
Hidrógeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Amoniaco	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Oxígeno	3 936	0	65	3 871	-	-	-	-	-	-
Argon	214	5	5	109	-	-	-	-	-	-
Agua	-	-	-	-	148 807	148 807	148 807	148 807	767 163	652 088
Dióxido de carbono	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sales	-	-	-	-	21	21	21	21	346	342
Cloro 10 ³	-	-	-	-	74	74	74	1	20	19
Sólidos 10 ⁴	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes 10 ⁴	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TOTAL	9 544	12 849	70	4 080	148 828	148 828	148 828	148 828	767 509	652 430
T (°C)	-174.9	-193.9	-181.7	-181.7	16	16	16	16	16	16
H (kJ/kg)	-381.0	-226.1	-385.5	-179.4	67	67	67	67	67	67
P (kPa)	506.6	121.6	121.6	121.6	101	1 000	980	980	980	880

Tabla XII. Balances de materia. Parte 3 (corrientes 28 a 36)

Flujo másico (kg/h)	28	29	29.2	30	31	32	33	34	35	36
Nitrógeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hidrógeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2 773
Amoniaco	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Oxígeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Argon	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Agua	33 733	618 356	618 356	115 074	80 552	34 522	34 522	33 487	33 487	50
Dióxido de carbono	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sales	18	324	324	3	3	-	-	-	-	-
Cloro 10 ³	1	19	19	-	-	-	-	-	-	-
Sólidos 10 ⁴	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes 10 ⁴	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TOTAL	33 751	618 680	618 680	115 077	80 555	34 522	34 522	343 487	33 487	2 823
T (°C)	16	16	16	16	16	16	16	16	85	100
H (kJ/kg)	67	67	67	67	67	67	67	67	355	1 424
P (kPa)	880	880	980	880	780	780	690	350	300	300

Tabla XIII. Balances de materia. Parte 4 (corrientes 37 a 45)

Flujo másico (kg/h)	37	38	39	40	41	42	43	44	45
Nitrógeno	-	-	-	-	-	12 844	12 844	12 844	62 430
Hidrógeno	2 773	2 773	-	2 773	2 773	-	-	2 773	13 303
Amoniaco	-	-	-	-	-	-	-	-	1 423
Oxígeno	-	-	22 006	-	-	0.64	0	0	0
Argon	-	-	-	-	-	5	5	5	158
Agua	50	50	25	-	-	-	-	-	-
Dióxido de carbono	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sales	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cloro 10 ³	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sólidos 10 ⁴	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes 10 ⁴	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TOTAL	2 823	2 823	22 031	2 773	2 773	12 850	12 849	15 622	77 313
T (°C)	123	50	100	50	230	230	230	230	200
H (kJ/kg)	1 758	709	93	720	3 344	260	260	810	714
P (kPa)	1 225	1 1175	300	993	20 265	20 265	20 265	20 265	20 265

Tabla XIV. Balances de materia. Parte 5 (corrientes 46 a 54)

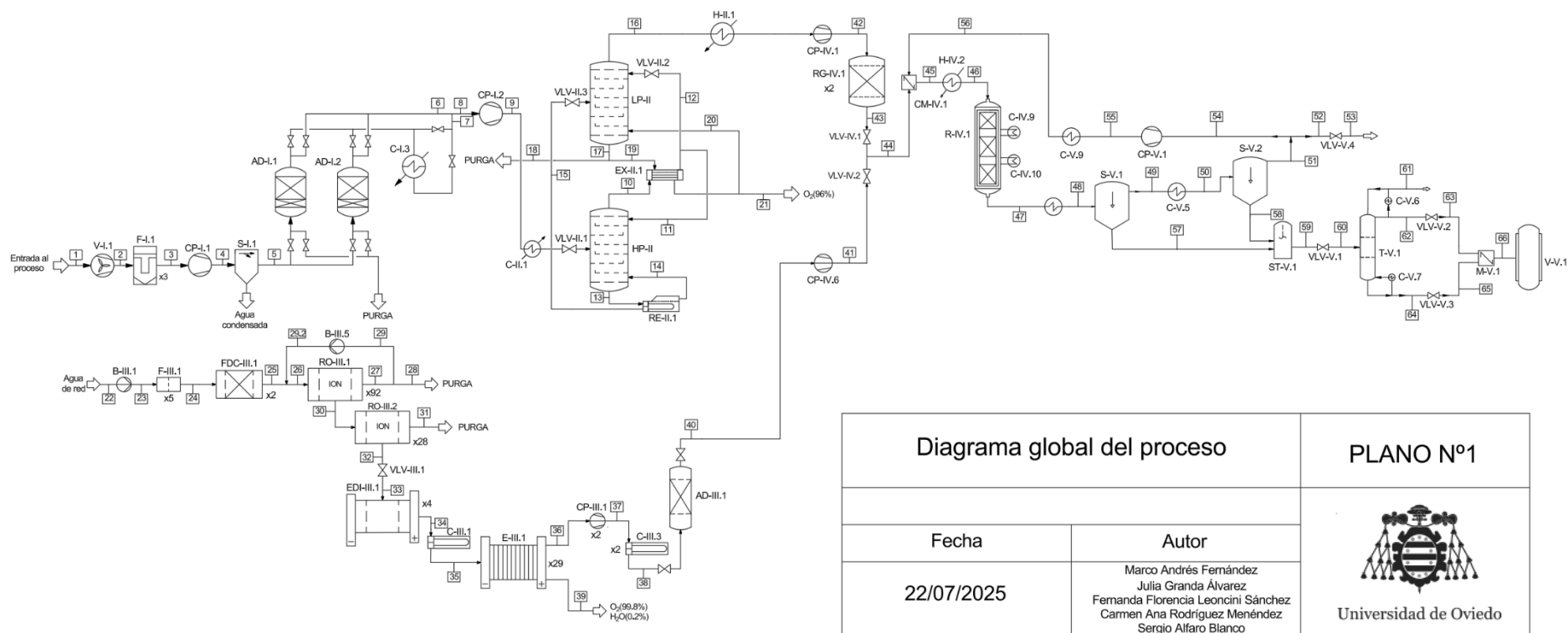
Flujo másico (kg/h)	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Nitrógeno	62 430	49 670	49 670	49 650	49 650	49 630	69	69	49 561
Hidrógeno	13 303	10 471	10 471	10 465	10 465	10 458	10	10	10 448
Amoniaco	1 423	16 878	16 878	13 322	13 322	2 226	806	806	1 420
Oxígeno	0	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.46 \cdot 10^{-3}$	$1.46 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$1.43 \cdot 10^{-3}$
Argon	158	158	158	157	157	154	1	1	153
Agua	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dióxido de carbono	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sales	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cloro 10^3	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sólidos 10^4	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes 10^4	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Flujo másico (kg/h)	46	47	48	49	50	51	52	53	54
TOTAL	77 313	77 177	77 177	73 594	73 594	62 469	885	885	61 584
T (°C)	400	417	25	25	-35	-35	-35	-35	-35
H (kJ/kg)	1 403		-700.3	-511.9	-891.9	-891.9	-298.7	-298.7	-298.7
P (kPa)	20 265	20 229	20 215	20 215	20 198	20 198	20 198	101 325	20 198

Tabla XV. Balances de materia. Parte 6 (corrientes 55 a 66)

Flujo másico (kg/h)	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66
Nitrógeno	49 562	49 562	20	19	39	39	39	0	0	0	0	0
Hidrógeno	10 448	10 448	6	8	14	14	14	0	0	0	0	0
Amoniaco	1 420	1 420	3 556	11 095	14 651	14 651	0	1	1	14 650	14 650	14 651
Oxígeno	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$6.22 \cdot 10^{-6}$	$1.27 \cdot 10^{-5}$	$1.89 \cdot 10^{-5}$	$1.89 \cdot 10^{-5}$	$1.89 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0	0
Argon	153	153	1	3	4	4	1	0	0	3	3	3
Agua	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dióxido de carbono	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sales	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cloro 10^3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sólidos 10^4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes 10^4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TOTAL	61 584	61 584	3 583	11 125	14 708	14 708	54	1	1	14 653	14 653	14 654
T (°C)	-34.9	200	25	-35	-18	-13	-142	-142	-141.7	50	-33	-33
H (kJ/kg)	-297.8	184.5	518.6	-3 861	-4 171	-4 084	-741	-4 666	-4 666	-3 797	-3 797	-4 666
P (kPa)	20 265	20 265	20 215	20 198	20 198	2 200	2 000	2 000	600	2 020	600	101 325

5. DIAGRAMA DE FLUJO GENERAL

Fig. 12. Diagrama de flujo general del proceso





Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

SECCIÓN I: PRETRATAMIENTO DEL AIRE

Por

Julia Granda Álvarez

Oviedo, julio de 2025

ÍNDICE

I.1. INTRODUCCIÓN	64
I.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	67
I.3. DISEÑO DEL PRETRATAMIENTO DEL AIRE	70
I.3.1. Descripción de las unidades	71
I.3.1.1. Equipos para la eliminación de contaminantes sólidos	71
I.3.1.1.1. Filtro V-I.1	71
I.3.1.2. Equipos para la eliminación de contaminantes homogéneos	72
I.3.1.2.1. Equipo de adsorción TSA: AD-I.1 y AD-I.2	73
I.3.2. Estrategia de diseño y resultados obtenido	74
I.3.2.1. Filtros de bolsas (F-I.1, F-I.2 y F-I.3)	74
I.3.2.2. Separador S-I.1.	76
I.3.2.2.1. Balances de materia	76
I.3.2.2.2. Diseño del separador de fases	78
I.3.2.3. Equipo de adsorción TSA AD-I.1 y AD-I.2	80
I.3.2.3.1. Cálculo de la masa de adsorbato	80
I.3.2.3.2. Cálculo de las dimensiones del equipo	82
I.3.2.3.3. Optimización del tiempo de ciclo	84
I.3.2.3.4. Cálculo del tiempo de saturación	86
I.3.2.3.5. Cálculo de las etapas de desorción	87
I.3.2.4. Equipos auxiliares	88
I.3.2.4.1. Ventilador V-I.1	88
I.3.2.4.2. Compresor CP-I.1	89
I.3.2.4.3. Compresión CP-I.2 y CP-I.3	90
I.3.2.4.4. Cambiador C-I.2.	91
I.3.2.4.5. Cambiadores de refrigeración: C-I.1, C-I.3 y C-I.4	92
I.4. DISEÑO MECÁNICO	94
I.4.1. Diseño mecánico de la torre de adsorción	95

I.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA	97
I.5.1. Equipos	98
I.5.1.1. Ventilador V-I.1	98
I.5.1.2. Filtros de bolsas (F-I.1, F-I.2 y F-I.3)	98
I.5.1.3. Compresores CP-I.1 y CP-I.2	99
I.5.1.4. Separador de fases S-I.1	99
I.5.1.5. Adsorbedores AD-I.1	99
I.5.1.6. Cambiadores de calor:	100
I.5.2. Consumibles	101
I.5.2.1. Vapor Vivo	101
I.5.2.2. Refrigerante (amoníaco)	101
I.5.2.3. Electricidad	102
I.5.2.4. Mantenimiento de los lechos	102
I.6. BIBLIOGRAFÍA	103
APÉNDICE I-A: LISTA DE SÍMBOLOS	108
I-A.1. Símbolos latinos	109
I-A.2. Símbolos griegos	109
I-A.3. Abreviaturas	110
I-A.4. Nomenclatura propia del código ASME	110
APÉNDICE I-B: TABLAS Y GRÁFICAS	111
I-B.1 Evaluación económica	112
I-B.3. Otras tablas y gráficas	113
APÉNDICE I-C: OTROS CÁLCULOS	116
I-C.1. Ecuaciones para el cálculo de los parámetros de la isoterma de langmuir extendida y modificada	117

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla I.I. Valores límite ambientales de algunos contaminantes regulados por ley. (Ayuntamiento de Gijón 2023; Gobierno del Principado de Asturias 2022)	66
Tabla I.II. Balances de materia de la sección I. Corrientes 1 a 6.	69
Tabla I.III. Balances de materia de la sección I. Corrientes 7 a 9.	69
Tabla I.IV. Concentración de los distintos contaminantes gaseosos en la zona de Gijón. (Gobierno del Principado de Asturias 2022)	72
Tabla I.V. Propiedades de los adsorbentes utilizados para el TSA. (Zhang y Wang 2013)	73
Tabla I.VI. Términos y valores de las ecuaciones I.2 a I.4 para el cálculo de la caída de presión. Los números indicados en negro son datos. * Valores necesarios para realizar el cálculo final, pero a su vez calculados a partir de los datos.	75
Tabla I.VII. Parámetros de Antoine para los rangos de temperatura de operación del presente proceso. (Stull 1947; Liu, C.-T, Lindsay, W.T., y Jr. 1970)	77
Tabla I.VIII. Cálculos de las corrientes entorno al separador.	78
Tabla I.IX. Cálculo de la capacidad de adsorción de cada adsorbente para cada adsorbato.	82
Tabla I.X. Masa de adsorbente necesaria para la eliminación completa de agua y dióxido de carbono y volumen de los lechos.	82
Tabla I.XI. Dimensionado de los lechos.	84
Tabla I.XII. Cálculos para calcular el tiempo de saturación de cada uno de los lechos	87
Tabla I.XIII. Cronograma de un ciclo de adsorción completo. DP: Despresurización, C: Calentamiento, F: Enfriamiento, PR: Presurización.	88
Tabla I.XIV. Parámetros de diseño de los cambiadores de calor C-I.1, C-I.3 y C-I.4	93
Tabla I.XV. Cálculo de costes de los compresores	99
Tabla I.XVI. Cálculo del peso y del precio del equipo de adsorción	100
Tabla I. XVII. Cálculo del precio para cambiadores de calor	100
Tabla I.XVIII. Consumo eléctrico de los equipos de impulsión de gases de la Sección I.	102

APÉNDICES:

Tabla I-B.I. Características del clima de Gijón. (Atlas)	113
Tabla I-B. II. Cálculos para la optimización del tiempo de ciclo de adsorción	114
Tabla I-B.III. Tabla completa para el cálculo del área de los cambiadores C-I.1, C-I.3 y C-I.4	115
Tabla I-B.IV. Constantes empleadas en el cálculo de los parámetros de la isoterma de Langmuir extendida y modificada. (Lian et al. 2019)	117
Tabla I-B.V. Datos de equilibrio para la adsorción de CO ₂ por parte de la Zeolita 13X.	118

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. I.1. Diagrama de flujo de la Sección I.	68
Fig. I.2. Características del filtro de bolsas.	74
Fig. I.3. Esquema de un separador de fases vertical con malla. (Elaboración propia)	76
Fig. I.4. Estudio de la pérdida de eficacia de distintos tipos de zeolitas según el número de ciclos transcurridos a distintas temperaturas de regeneración. (Jacobs et al. 2021)	84
Fig. I.5. Optimización del tiempo de adsorción (tiempo de ciclo) en base al coste anual de los adsorbentes (línea gris) y de la pérdida de carga (línea amarilla)	85
Fig. I.6. Esquema del ciclo de adsorción. En verde la adsorción, en rojo la desorción. La línea punteada indica el trayecto en la etapa de calentamiento. a) 0 a 12 horas, b) 12 a 24 horas. (Elaboración propia)	86
Fig. I.7. Curva característica y especificaciones del ventilador V-I.1. (Sodeca). Las líneas rojas muestran las condiciones de trabajo del ventilador.	89

APÉNDICES:

Fig. I-B.1. Coste de compra de lavadores para polvo. (Peters, Timmerhaus y West 2003)	112
Fig. I-B.2. Coste de compra de intercambiadores de calor de carcasa y tubo, con tubos fijos. Pinch cuadrado de 0.019 m OD x 0.025 m y carcasa de acero al carbono que opera a 1035 kPa de 4.88 o 6.10 m. (Peters, Timmerhaus y West 2003)	112
Fig. I-B.3. Selección de compresores basado en el rango típico de operación de los tipos de compresores disponibles industrialmente. Para las líneas sólidas usar el eje izquierdo (cabeza); para las líneas discontinuas, usar el eje derecho (presión).	113
Fig. I-B.4. Presión de vapor del amoniaco en función de la temperatura («The Engineering ToolBox»)	115
Fig. I-B.5. Líneas de ajuste para la determinación de expresiones matemáticas que permitan calcular los distintos parámetros de las ecuaciones de la isoterma de Langmuir modificada y extendida en función de la temperatura.	118

I.1. INTRODUCCIÓN

El aire es un medio gaseoso heterogéneo, compuesto esencialmente por nitrógeno (78.1%), oxígeno (20.96%) e inertes (0.94%) entre los que se incluyen argón, helio o hidrógeno. Además, el aire tiene un porcentaje de humedad variable, que depende del clima de cada región; dióxido de carbono; partículas sólidas, y otros compuestos gaseosos, orgánicos o no, en distintas proporciones. Por tanto, la primera etapa en cualquier proceso de licuefacción de aire debe ser el pretratamiento del mismo; se someterá a la corriente de aire a una serie de operaciones de limpieza y purificación para evitar que impurezas sean arrastradas a etapas posteriores del proceso.

Los equipos principales susceptibles de sufrir daños por alguna de estas sustancias (de ahora en adelante contaminantes) son:

- 1) **Los compresores.** Es necesario eliminar las partículas de tamaño superior a las 10 micras; partículas más pequeñas no suelen tener energía cinética suficiente como para causar daño estructural en los álabes de los compresores (Alqallaf et al. 2020).
- 2) **La doble columna Linde.** Debido a las bajas temperaturas a las que opera, existe el riesgo de que haya vapores y gases que cristalicen en el interior de la misma, entorpeciendo su funcionamiento, contaminando el producto o, en el peor de los casos, pudiendo suponer un problema de seguridad. (Singla y Chowdhury 2019; Rege, Yang y Buzanowski 2000a).
- 3) **Equipos de adsorción.** Utilizados para la eliminación de los contaminantes homogéneos previa entrada a la doble columna. Partículas de pequeño tamaño podrían provocar obstrucción en la torre de adsorción, por lo que deben ser eliminadas para prevenir problemas.

Para diseñar un buen sistema de pretratamiento de aire es necesario conocer la composición exacta del aire que se va a tratar. Sin embargo, debido a que la localización de la planta es un polígono industrial de nueva construcción, se carece de datos de calidad de aire en la zona. Por tanto, para la realización de los cálculos se harán algunas estimaciones basadas en dos informes que contienen información de la ciudad de Gijón, que se encuentra a apenas 5 kilómetros del polígono: “Calidad del Aire en Asturias 2022” y “Calidad del aire en Gijón/Xixón 2023” (Ayuntamiento de Gijón 2023; Gobierno del Principado de Asturias 2022). En la Tabla I.I. se extraen los valores límite para los distintos contaminantes mencionados en los informes. El pretratamiento del aire consistirá en las siguientes etapas:

- Una etapa de eliminación de partículas en dos etapas: primero un separador inercial y, a continuación, un filtro de bolsas.

- Una etapa de eliminación de contaminantes homogéneos. En primer lugar, se realizará una condensación para eliminar el aire en exceso antes de entrar a una etapa de adsorción.

Además de la eliminación de posibles contaminantes, también es objeto de esta sección presurizar el aire para llevarlo a las condiciones de operación requeridas para realizar la destilación criogénica.

Tabla I.I. Valores límite ambientales de algunos contaminantes regulados por ley. (Ayuntamiento de Gijón 2023; Gobierno del Principado de Asturias 2022)

Contaminante	Límite (mg/m ³)	Tiempo del Límite
Dióxido de Azufre	0.350	Horario
Dióxido de Nitrógeno	0.200	Horario
Monóxido de Carbono	10	Máxima diaria
Ozono	0.120	Máxima diaria
Benceno	0.005	Anual
Partículas	Límite (µg/m ³)	Tiempo del Límite
PM ₁₀	50	Media diaria
PM _{2.5}	20	Anual

I.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

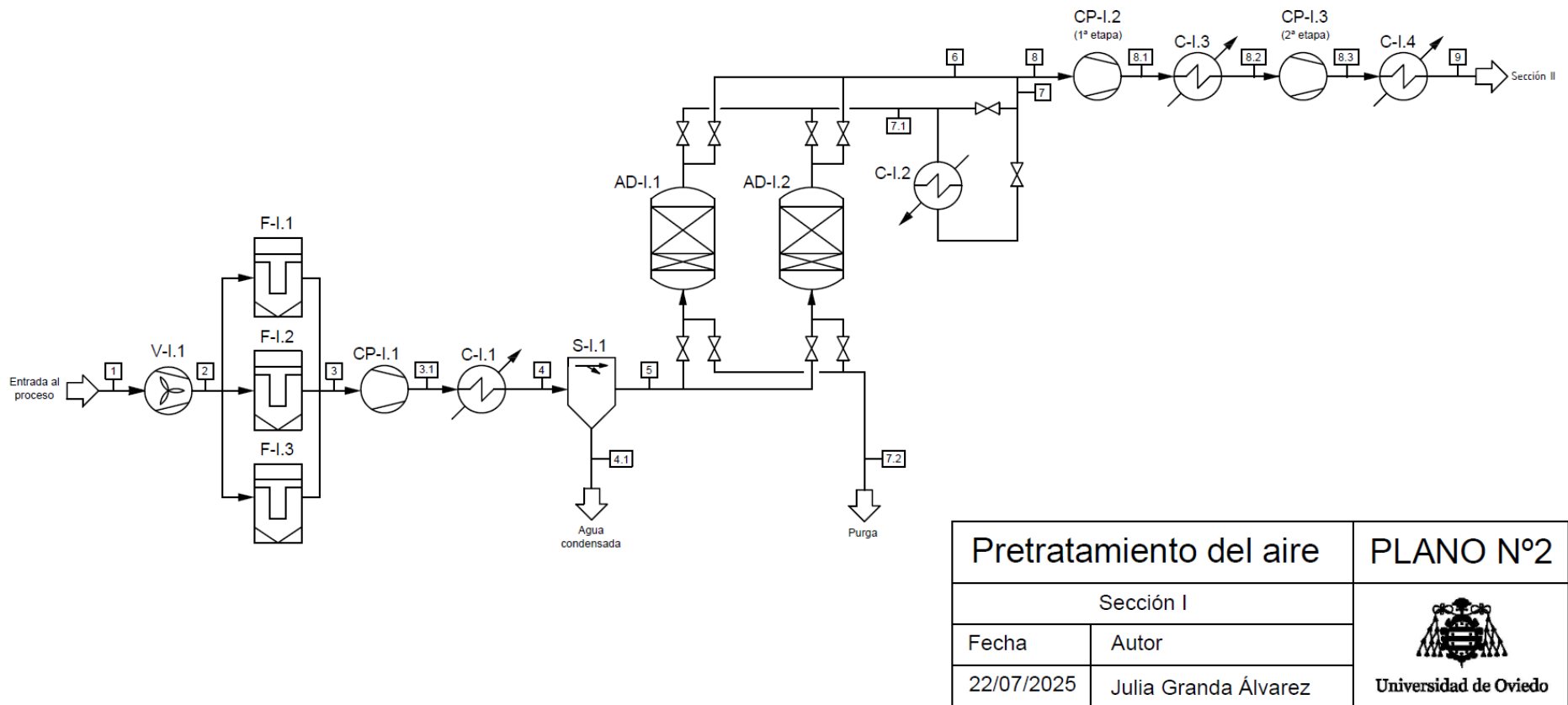


Fig. I.1. Diagrama de flujo de la Sección I.

Tabla I.II. Balances de materia de la sección I. Corrientes 1 a 6.

Flujo másico (kg/h)	1	2	3	3.1	4	4.1	5	6
Nitrógeno	14 271	14 271	14 271	14 271	-	14 271	14 271	14 271
Oxígeno	4 374	4 374	4 374	4 374		4 374	4 374	4 374
Argón	243	243	243	243		243	243	243
Agua	448	448	448	448	-	403	45	-
Dióxido de carbono	14	14	14	14	-	-	14	-
Sólidos (x10 ⁴)	15	15	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes (x10 ⁴)	2	2	2	2	2	2	2	-
TOTAL	19 350	19 350	19 350	19 350	-	19 291	18 947	18 888
T (°C)	15	15	15	195	0	15	15	15
H (kJ/kg)	75.0	75.0	75.0	256.1	75.1	63.0	21.0	15.1
P (kPa)	101.3	102.8	102.8	555	403	555	555	555

Tabla I.III. Balances de materia de la sección I. Corrientes 7 a 9.

Flujo másico (kg/h)	7	7.1	7.2	8	8.1	8.2	8.3	9
Nitrógeno	1 427	1 427	1 427	12 844	12 844	12 844	12 844	12 844
Oxígeno	437	437	437	3 937	3 937	3 937	3 937	3 937
Argón	24	24	24	218	218	218	218	218
Agua	-	-	45	-	-	-	-	-
Dióxido de carbono	-	-	14	-	-	-	-	-
Sólidos (x10 ⁴)	-	-	-	-	-	-	-	-
Otros contaminantes (x10 ⁴)	-	-	2	-	-	-	-	-
TOTAL	1 889	1 889	1 948	16 999	16 999	16 999	16 999	16 999
T (°C)	15	15 ó 180	Variable	15	110.0	15.0	110.0	15
H (kJ/kg)	15.1	Variable	Variable	15.1	110.8	15.1	110.8	15.1
P (kPa)	555	101.3	101.3	555	1 498.5	1 498.5	4 053	4 053

I.3. DISEÑO DEL PRETRATAMIENTO DEL AIRE

I.3.1. DESCRIPCIÓN DE LAS UNIDADES

I.3.1.1. Equipos para la eliminación de contaminantes sólidos

Tal y como se indicó en el planteamiento, es crítico para el buen funcionamiento de los compresores la eliminación de partículas de tamaño superior a las 10 micras. Las partículas de tamaño inferior también pueden resultar molestas, así que es recomendable eliminarlas. Los estudios de calidad del aire consultados (Ayuntamiento de Gijón 2023; Gobierno del Principado de Asturias 2022) no aportan información acerca de la presencia de partículas de gran tamaño, así que se supondrá que un filtro será suficiente para eliminar todas partículas presentes en el aire.

I.3.1.1.1. Filtro V-I.1

Para la elección del tipo de filtro de tela en primer lugar se ha considerado utilizar un filtro de mangas. Sin embargo, la concentración de partículas en el aire es muy inferior a la concentración habitual para la cual están diseñados dichos equipos; típicamente se usan para tratar efluentes gaseosos de salida de instalaciones en que se produce mucho polvo, como por ejemplo aserraderos o cementeras, por lo que la concentración de partículas sólidas es del orden de varios gramos por metro cúbico de aire.

Se desconocen los datos exactos de concentración de partículas en el polígono industrial en el que se instaurará el proceso, así que se hará una aproximación a partir de los datos de un informe de calidad del aire de la ciudad de Gijón de 2023; según dicho informe la estación de Castilla registró una concentración pico de partículas de $103 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en el mes de marzo de 2023 (Ayuntamiento de Gijón 2023). Cabe mencionar que dicho valor es anormalmente alto, ya que el umbral superior es de $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Las partículas sólidas en la ciudad de Gijón tienen su origen no solo en el tráfico, sino también en las emisiones procedentes otras grandes industrias cercanas, susceptibles de emitir partículas a la atmósfera, a pesar de las medidas de prevención de la contaminación, como pueden ser acerías, cementeras, etc. La localización de la planta está a una distancia similar de dichas industrias que la ciudad, por lo que es de esperarse que la concentración de partículas sea parecida. Por tanto, para ser conservadores, se ha considerado una concentración de partículas de 103 microgramos por metro cúbico de aire.

Dada la concentración de partículas se ha decidido que la mejor opción es la utilización de filtros de bolsas, típicamente usados para el acondicionamiento de aire en oficinas, hospitales y laboratorios, o como prefiltros para los filtros HEPA.

I.3.1.2. Equipos para la eliminación de contaminantes homogéneos

Recordando lo mencionado en el planteamiento, resulta fundamental la eliminación de vapor de agua, dióxido de carbono y acetileno en el aire de entrada a la columna de destilación, ya que esto podría ocasionar serios problemas. La concentración general a nivel del mar de dióxido de carbono es de 427 ppm según datos de febrero de 2025 (NASA 2025), mientras que la cantidad de vapor de agua puede llegar hasta las 50 000 ppm (5% en volumen) (Qi et al. 2022), aunque depende mucho de la presión y de la temperatura de cada región.

La concentración de hidrocarburos en el aire es variable y depende de la zona; sin embargo, se estima que la concentración media es muy baja, de partes por millón o partes por trillón. Los análisis de calidad del aire del municipio de Gijón determinan que la concentración de contaminantes es inferior al límite establecido por ley (Gobierno del Principado de Asturias 2022). Dichos límites se recogen en la Tabla I.IV. Para hacer la conversión desde las unidades se ha utilizado la ecuación I.1.

$$c_{PPMv} = \frac{22.4 c_{mg/m^3}}{PM} \quad [I.1]$$

Donde c_{PPMv} es la concentración del contaminante en partes por millón en volumen, c_{mg/m^3} la concentración en miligramos por metro cúbico y PM el peso molecular del mismo.

Se observa que el único contaminante que se encuentra recogido en ambas listas (Tabla VII y Tabla I.IV) es el dióxido de nitrógeno, para la cual su concentración en el aire de Gijón es inferior a la máxima requerida, por lo que la preocupación por su eliminación será menor. El resto de contaminantes no figuran dentro de la Tabla I.IV, por lo que es de esperarse que no alteren el proceso.

Tabla I.IV. Concentración de los distintos contaminantes gaseosos en la zona de Gijón. (Gobierno del Principado de Asturias 2022)

Contaminante	Límite (mg/m ³)	Límite (ppmv)	Tiempo de Límite
Dióxido de Azufre	0.350	0.0408	Horario
Dióxido de Nitrógeno	0.200	0.0233	Horario
Monóxido de Carbono	10	1.167	Máxima diaria
Ozono	0.120	0.014	Máxima diaria
Benceno	0.005	$5.833 \cdot 10^{-4}$	Anual

Por otro lado, no se han encontrado datos concretos acerca de la concentración de acetileno ya que no es un contaminante regulado por ley, aunque la presencia general del mismo en el aire atmosférico es del orden de partes por millón o billón. Aun así, el proceso

posee una alta sensibilidad a este tipo de contaminantes, por lo que se considerará como relevante y será necesario eliminarlo en el pretratamiento.

1.3.1.2.1. Equipo de adsorción TSA: AD-I.1 y AD-I.2

Para la selección de los adsorbentes, se recomienda utilizar una combinación de lechos para la prepurificación de aire (Zhang, Wang y Wang 2024; Rege, Yang y Buzanowski 2000b), pues cada tipo de zeolita resulta óptimo para la eliminación de distintos tipos de contaminantes:

- **Zeolita 13X.** Es el mejor adsorbente para la eliminación del CO₂, y de agua a altas presiones parciales (>100ppm). También es adecuado para la eliminación de hidrocarburos. (Kumar et al. 2003a)
- **Alúmina (γ -Al₂O₃).** Es la mejor opción para la eliminación de vapor de agua. Además, presenta una muy baja afinidad por los componentes mayoritarios del aire, lo cual es una característica muy deseable para la mayoría de adsorbentes. (Kumar et al. 2003a)

Por otro lado, cabe mencionar que la capacidad de adsorción del CO₂ de los sólidos se reduce cuando hay vapor de agua presente, debido a fenómenos de competición; además, el calor necesario para regenerar totalmente la zeolita disminuye (Wang et al. 2022). Por tanto, el primer lecho de la torre de adsorción será la alúmina cuya función será retirar el agua de la corriente gaseosa, seguida de un lecho de zeolita 13X para eliminación de dióxido de carbono y otros contaminantes residuales. Las propiedades de los adsorbentes se recogen en la Tabla I.V.

Tabla I.V. Propiedades de los adsorbentes utilizados para el TSA. (Zhang y Wang 2013)

	Zeolita 13x	Alúmina activada
Densidad lecho (kg/m ³)	609	820
Diámetro de partícula (mm)	2.5	5
Fracción de huecos lecho	0.37	0.26
Fracción huecos partícula	0.24	0.28
Capacidad calorífica (kJ/kg K)	0.92	0.92
Calor adsorción agua (kJ/mol)	62.7	54.4
Calor adsorción CO ₂ (kJ/mol)	34.3	33.4
Factor de tortuosidad	4.2	3.6

I.3.2. ESTRATEGIA DE DISEÑO Y RESULTADOS OBTENIDO

I.3.2.1. Filtros de bolsas (F-I.1, F-I.2 y F-I.3)

El diseño de un filtro de bolsas es un proceso largo, complicado y que requiere poseer gran cantidad de conocimientos; hay que conocer en detalle las características de las distintas telas disponibles en el mercado, lo que incluye tamaño de fibra, hilado y su interacción con distintos tipos de partículas sólidas (Heinz Brauner y Yamanchili B.B. Varma 1981). Por tanto, dadas las características de este trabajo, resulta mucho más eficiente escoger uno de los muchos filtros comerciales disponibles.

El catálogo de la empresa española *Ventfilter* cuenta con varios modelos de filtros de bolsas, entre los cuales se ha escogido el modelo *Bag-glass 90 (galvanizado)*. El medio filtrante está compuesto por fibra de vidrio, que garantiza una baja pérdida de carga inicial y una excelente capacidad de acumulación de polvo, siendo apto para su utilización en procesos industriales.

Dentro de este modelo de filtro existen distintos tamaños y, dado el elevado caudal de gas del proceso, se ha escogido el modelo con mayor caudal nominal. Su referencia es “BG24362510F9”. Las características de este filtro, así como una imagen del mismo, se muestran en la Figura I.2.

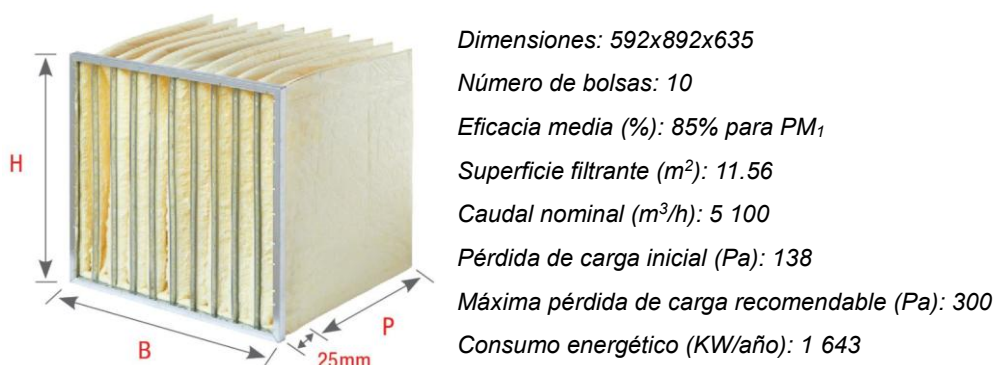


Fig. I.2. Características del filtro de bolsas.

Considerando el flujo nominal del filtro y que el flujo del proceso es de $15\,207.9\,m^3/h$, se calcula que se necesitan 3 filtros. El flujo real por cada uno de los filtros será de $5069.3\,m^3/h$

La pérdida de carga inicial del filtro es de 138 Pa, según datos del fabricante, e irá aumentando progresivamente durante su tiempo de vida debido a la acumulación de la torta filtrante. Para el cálculo de la caída de presión de la torta filtrante se usará la ecuación I.2 (Heinz Brauner y Yamanchili B.B. Varma 1981). Los distintos términos de las ecuaciones están explicados en la Tabla I.VI.

El valor de la caída de presión máxima de la torta filtrante, que ha de ser sustituido en la fórmula para calcular el tiempo de operación, corresponde a la diferencia entre la caída de presión máxima del dispositivo menos la caída de presión del medio filtrante solamente. En cuanto a la porosidad del medio filtrante, se ha escogido un valor estándar, ya que se desconoce cuál será la porosidad real de la torta (Heinz Brauner y Yamanchili B.B. Varma 1981).

El cálculo ha sido realizado considerando que la concentración de partículas es de $103 \mu\text{g}/\text{m}^3$ y, a modo de simplificación, todas ellas tienen un tamaño de $10 \mu\text{m}$. La densidad de las partículas corresponde a la densidad del hierro, ya que la planta va a estar localizada en las inmediaciones de una acería, por lo que es esperable que gran cantidad de las partículas que entren al proceso provengan de ahí. Como se puede observar, muchos de los datos utilizados para el cálculo proceden de suposiciones, así que en caso de implementación real sería necesario repetir los cálculos con valores más fiables.

Finalmente, despejando la Ecuación I.2 se obtiene un tiempo de operación de $4.22 \cdot 10^7 \text{ s}$, lo cual equivale a 489 días.

$$\frac{\rho u_{\infty}^2 / 2}{\Delta p} = \frac{1}{600} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \frac{\varepsilon_g - \varepsilon}{1 - \varepsilon_g} \frac{d_p^2}{\eta t} \quad [\text{I.2}]$$

$$\varepsilon_g = 1 - dc \quad [\text{I.3}]$$

$$dc = \frac{V_p}{V} = \frac{M_p}{\rho_p} \quad [\text{I.4}]$$

Tabla I.VI. Términos y valores de las ecuaciones I.2 a I.4 para el cálculo de la caída de presión. Los números indicados en negro son datos. * Valores necesarios para realizar el cálculo final, pero a su vez calculados a partir de los datos.

Símbolo	Significado	Unidades	Valor
ρ	Densidad del gas	kg/m^3	1.24
u_{∞}	Velocidad de filtración	m/s	0.122
Δp	Caída de presión	Pa	162
ε	Porosidad de la torta filtrante	-	0.8
ε_g	Porosidad del gas	-	$\approx 1^*$
d_p	Diámetro de partícula	m	10^{-8}
η	Viscosidad del gas	$\text{Pa} \cdot \text{s}$	$1.6 \cdot 10^{-5}$
t	Tiempo transcurrido	s	-
dc	Concentración de polvo	m^3/m^3	$1.31 \cdot 10^{-11*}$
V_p	Volumen de partículas	m^3	-
V	Volumen total del gas	m^3	-
M_p	Concentración en peso de partículas sólidas	kg/m^3	$1.03 \cdot 10^{-7}$
ρ_p	Densidad de las partículas sólidas	kg/m^3	7 874

I.3.2.2. Separador S-I.1.

Tras la eliminación de partículas y debido a la compresión de la corriente de aire hasta las condiciones de operación de la columna de adsorción, parte de la humedad presente en el aire de entrada condensará. Para evitar que empape el lecho de adsorción dicha agua debe ser eliminada mediante un separador de fases. En la Figura I.3 se muestra un esquema del equipo.

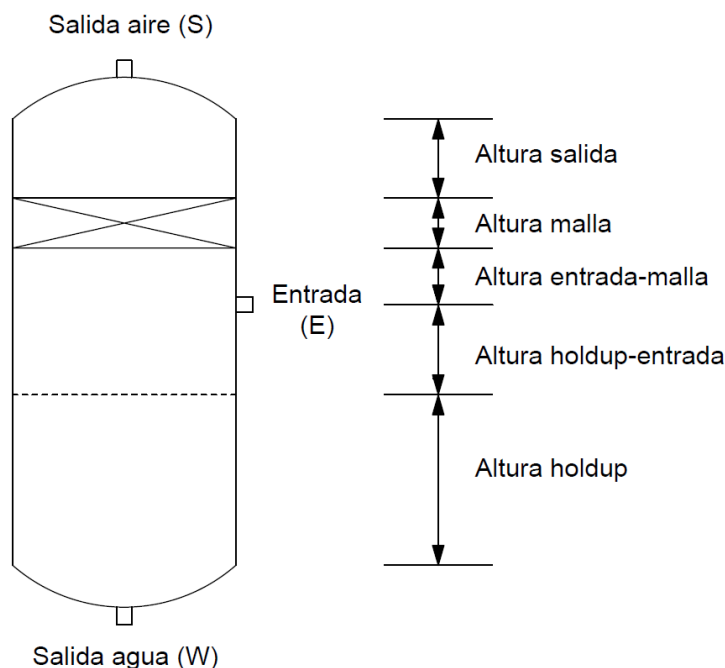


Fig. I.3. Esquema de un separador de fases vertical con malla. (Elaboración propia)

I.3.2.2.1. Balances de materia

Para calcular la cantidad de agua que entra al proceso es necesario conocer las características del aire de Gijón; para ello se han consultado datos de páginas online (Atlas). En el Apéndice I-B, Tabla I-B.I., se puede ver los datos extraídos de referencias online y el tratamiento que se les ha aplicado. Los números con los que se realizarán los cálculos son: temperatura media de 16.9 °C (289.9 K), humedad relativa del 80% y presión de 101813.3 Pa.

A continuación, se aplican las ecuaciones I.5, I.6 y I.7 para calcular la presión parcial de agua y la humedad absoluta.

$$\phi = \frac{P_{agua}}{P_{agua}^*} \quad [I.5]$$

$$Y = \frac{y_{agua}}{y_{aire}} = \frac{P_{agua}}{P_T - P_{agua}} \quad [I.6]$$

$$Y' = Y \frac{PM_{agua}}{PM_{aire}} \quad [I.7]$$

Donde:

ϕ : Humedad relativa (%)

P : presión (Pa). El subíndice "T" se refiere a la presión atmosférica total, mientras que el superíndice * se refiere a las condiciones de saturación.

Y : Humedad absoluta molar ($\text{mol}_{\text{agua}}/\text{mol}_{\text{aire}}$)

y : Fracción molar

Y' : Humedad absoluta másica ($\text{masa}_{\text{agua}}/\text{masa}_{\text{aire}}$)

PM : Peso molecular (mol/kg)

La presión de saturación se calcula mediante la ecuación de Antoine (Ecuación I.8). Los parámetros de la ecuación de Antoine están tabulados para distintos intervalos de temperaturas, mostrándose en la Tabla I.VII. dichos parámetros en los rangos de temperatura de operación. Cabe mencionar que dichos parámetros están calculados para 1 atm de presión, siendo la presión de trabajo muy superior. Sin embargo, no se han encontrado datos tabulados para una presión de 5.5 bar.

$$\log_{10}(p) = A - \frac{B}{T + C} \quad [\text{I. 8}]$$

Donde:

p : presión (bar)

A, B, C : Parámetros de la ecuación de Antoine

T : Temperatura (K)

Tabla I.VII. Parámetros de Antoine para los rangos de temperatura de operación del presente proceso. (Stull 1947; Liu, C.-T, Lindsay, W.T., y Jr. 1970)

Rango T (K)	A	B	C
379 a 573	3.55959	643.748	-198.043
255.9 a 373	4.6543	1435.264	-64.848

El separador de fases diseñado en el apartado I.3.2.2.2. contiene una malla metálica que favorece el proceso de condensación de las gotículas de agua, lo cual permite una separación del 99% entre las dos fases. En la Tabla I.VIII. se muestran los cálculos realizados considerando que el flujo de aire es de 18 888.2 kg/h. Por tanto, haciendo la diferencia entre los flujos másicos de E y de S se obtiene que condensan 403.4 kg de agua a la hora.

Tabla I.VIII. Cálculos de las corrientes entorno al separador.

	E	S
Presión parcial del agua P_{agua}^* (Pa)	1 478	1 885
Humedad absoluta Y (mol/mol)	0.0147	0.0036
Humedad absoluta másica Y' (kg/kg)	0.0237	0.0057
Flujo másico agua (kg/h)	447.8	44.5

En apartados posteriores se necesitará la concentración de agua a la salida en unidades de PPMv, así que se procederá a su cálculo. Para ello hay que aplicar la fórmula I.9.

$$c_{PPMv} = \frac{\dot{m}_{H_2O}}{v_{T_{op}, P_{op}}} \cdot \frac{10^9}{PM_{H_2O}} \cdot \frac{RT_{op}}{P_{op}} \quad [I.9]$$

Donde:

$\dot{m}_{H_2O}$ representa el flujo másico de agua condensado (kg/h)

$v_{T_{op}, P_{op}}$ el flujo volumétrico de aire a la presión y temperatura de operación (m^3/h)

P_{op} : Presión de operación (Pa)

T_{op} : Temperatura de operación (K)

R : Constante de los gases ideales en unidades (J/mol K)

PM_{H_2O} : Peso molecular del agua (g/mol)

Considerando un flujo másico de agua no condensada de 44.5 kg/h, que el flujo volumétrico de aire a las condiciones de operación (5.55 bar, 15 °C) es 2676.1 m^3/h , la constante de los gases ideales que es 8.314 (SI) y el peso molecular del agua se obtiene una concentración de 3 805 ppm.

1.3.2.2.2. Diseño del separador de fases

El presente separador de fases se calculará siguiendo las instrucciones y reglas heurísticas del libro *Chemical Process Equipment*, por James R. Couper et al. (Couper, Penney y Walas 2010).

En primer lugar, y dado que las fases a separar serán aire y agua, se seleccionará un separador vertical. El cálculo del diámetro del equipo se realizará de acuerdo a la Ecuación I.10. Originalmente la ecuación proporciona los resultados en pies por segundo, así que el factor de 0.3048 es para convertir las unidades al sistema internacional.

$$u_s = 0.3048 K \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho} - 1} \quad [I.10]$$

Donde:

u_s : Velocidad del gas a través del separador (m/s)

K : Coeficiente dependiente del sistema. $K=0.35$ para condensación asistida por malla.

ρ_L : Densidad del líquido (kg/m³)

ρ : Densidad del aire (kg/m³)

Siguiendo las reglas heurísticas, al coeficiente K se le debe multiplicar un factor de $2/3$, ya que el equipo es vertical, resultando en un valor de 0.233 . La densidad del agua es de 999.3 kg/m^3 , y la del gas es de 7.06 kg/m^3 (humedad relativa del 100%), ambos a 1 atm y 15 °C («Aspen Hysys» 2025). Por otro lado, la velocidad del aire a través del equipo será de 0.84 m/s . Dado un flujo de $0.92 \text{ m}^3/\text{s}$, se calcula que el área necesaria será de 0.88 m . Por tanto, el diámetro del equipo es de 1.06 m .

La altura del equipo se determina sumando todas las alturas que se muestran en la Figura I.3. Se procede a calcular cada una de las alturas de forma individual. Cabe mencionar que, cuando la relación L/D del equipo es menor de 3 , se recomienda añadir longitudes arbitrarias para ajustarla al valor óptimo, que es 3 .

La altura del *holdup* se calcula considerando el flujo de agua líquida que entra en el equipo y el tiempo de residencia. Habitualmente se considera que 5 a 10 minutos es un tiempo de residencia adecuado, así que se tomará un valor de 10 minutos (600 s). El flujo másico de agua líquida es de 0.113 kg/s , así que considerando 999.3 kg/m^3 como la densidad del agua, y el área previamente calculada, se obtiene que la altura del *holdup* es de 0.08 m .

La altura *holdup*-entrada debe ser, como mínimo, de 18 pulgadas ($\approx 0.5 \text{ m}$). Sin embargo, para que la relación L/D sea adecuada se va a seleccionar una altura *holdup*-entrada de 0.96 m .

La altura entrada-malla debe ser, como mínimo, de 18 pulgadas; siguiendo el criterio anterior, se va a seleccionar una altura de 0.86 m . La altura malla-salida debe ser de, como mínimo, 12 pulgadas, así que se le asignarán 0.9 m .

El grosor de la malla metálica, cuya función es proporcionar a las gotículas de agua un lugar donde condensar, tendrá un grosor de 16 pulgadas (0.41 m) de acuerdo a las heurísticas. No se le asignará una longitud adicional ya que supondría una mayor inversión que no proporcionará beneficios.

Sumando todas las alturas mencionadas, la altura total del equipo será de 3.20 m, a lo cual hay que sumarle la altura de los cabezales. La relación L/D es de 3.02, lo cual se puede aproximar a 3, que de acuerdo a las heurísticas es la relación óptima.

I.3.2.3. Equipo de adsorción TSA AD-I.1 y AD-I.2

La adsorción es una operación unitaria de transferencia de materia que consiste en la eliminación de uno o más componentes de una fase fluida por adherencia a una fase sólida. Al igual que las filtraciones, se trata de una operación intrínsecamente discontinua, ya que la capacidad de adsorción de los sólidos es limitada; una vez saturados, es necesario someter a los sólidos a un proceso de regeneración en el que las moléculas adheridas a la fase sólida vuelven a ser liberadas a la fase gas. A este fenómeno se le denomina desorción.

Para diseñar un buen equipo es necesario considerar el ciclo completo de adsorción-desorción, lo cual incluye las siguientes etapas:

- 1) **Adsorción.** El sólido adsorbe los contaminantes de la fase gaseosa, produciendo a la salida un aire limpio.
- 2) **Despresurización.** Las presiones elevadas favorecen el proceso de adsorción, del mismo modo las bajas presiones favorecen la desorción.
- 3) **Calentamiento.** Las elevadas temperaturas favorecen los fenómenos de desorción.
- 4) **Enfriamiento.** Normalmente las zeolitas tienen una capacidad calorífica bastante elevada, por lo que una vez desorbidos los contaminantes, es necesario hacer circular aire frío para reducir su temperatura hasta las condiciones de operación.
- 5) **Re-presurización.** Se busca alcanzar nuevamente la presión de operación.

La etapa crítica del diseño es la primera, y las demás etapas deben adaptarse a ella. De acuerdo a la bibliografía las condiciones más adecuadas para realizar la adsorción de agua en zeolitas son 5.55 bares de presión y 15 °C de temperatura (Zhang y Wang 2013). Por otro lado, la desorción debe realizarse a presión atmosférica y a una temperatura de, al menos, 170 °C. El resto de parámetros de diseño, como la masa de adsorbente o el tiempo de ciclo, deben ser calculados.

I.3.2.3.1. Cálculo de la masa de adsorbato

Una vez seleccionados los adsorbentes es necesario calcular la cantidad que se necesita para cada uno de ellos. Para ello, lo primero es considerar la termodinámica del proceso, es decir, la cantidad máxima de adsorbato que es capaz de tolerar cada uno de los

adsorbentes en las condiciones de operación. El modelo termodinámico escogido es el de la isoterma de Langmuir extendida y corregida, que se muestra en la Ecuación I.11 (Lian et al. 2019).

$$q_i = \frac{q_{mi} b_i P_i e^{\frac{n_i P_i}{P_i^*}}}{1 + b_i P_i + b_j P_j} \quad [I.11]$$

Donde:

i : Adsorbato sobre el cual se está calculando la capacidad de adsorción

j : El otro adsorbato, que compite en el proceso de adsorción con el componente i

q : Moles del componente adsorbidos en el equilibrio (mol/kg)

q_m : Parámetro de adsorción máxima (mol/kg)

b : Parámetro de la isoterma de Langmuir (1/Pa)

P_i : Presión parcial de un componente (Pa)

n : Factor de corrección debido a fenómenos de condensación capilar del agua (Ahn y Lee 2004)

P_i^* : Presión de saturación del componente i

A su vez, los parámetros del modelo (q_{mi} , b_i y n_i) dependen de la temperatura, y deben ser calculados de acuerdo a las condiciones de operación (ver sección I-C.1. del Apéndice I-C). En el aire de entrada a la columna hay una mezcla gaseosa muy heterogénea. Sin embargo, a modo de simplificación se va a considerar que solo adsorben el agua y el CO₂; esto es porque el nitrógeno y el oxígeno apenas son adsorbidos por los adsorbentes y el resto de contaminantes están en concentraciones tan bajas que se puede suponer que son totalmente adsorbidos por los sólidos en su transcurso por el equipo.

En la Tabla I.IX. se muestra el cálculo de los parámetros de la adsorción y de la capacidad de adsorción de cada adsorbato para cada componente. La presión parcial del dióxido de carbono se calcula considerando que, actualmente, la concentración atmosférica de dióxido de carbono es de 427 ppmv (NASA 2025), mientras que la concentración de agua son los 3747 ppmv restantes después de la separación. Para convertir los valores de ppm a presiones parciales se aplicó la Ecuación I.12, donde P_{op} representa la presión de operación en pascales; el resto de términos ya han sido definidos con anterioridad.

$$P_i = \frac{c_{PPMv}}{10^{-6}} P_{op} \quad [I.12]$$

Tabla I.IX. Cálculo de la capacidad de adsorción de cada adsorbente para cada adsorbato.

	q_m (mol/kg)	b (1/Pa)	n	P (Pa)	q (mol/kg)
Zeolita 13X + Agua	10.36	$2.80 \cdot 10^{-1}$	0.30	1885	12.51
Alúmina activada + Agua	3.35	$4.13 \cdot 10^{-2}$	1.27	1885	11.76
Zeolita 13X + CO ₂	7.00	$2.69 \cdot 10^{-1}$	0	237	0.752
Alúmina activada + CO ₂	1.11	$1.12 \cdot 10^{-4}$	0	237	$3.74 \cdot 10^{-4}$

El primero de los lechos con los que va a entrar en contacto la corriente gaseosa es la alúmina activada, y cuya función será la eliminación de agua; a continuación, el CO₂ junto con otros contaminantes marginales serán eliminados con el lecho de zeolita 13X. Para simplificar los cálculos se considerará que la alúmina activada adsorberá toda el agua, y solo el agua (según puede verse en la Tabla I.IX su afinidad por el dióxido de carbono es muy baja), mientras que la zeolita 13 X eliminará todo el dióxido de carbono.

La masa de adsorbente necesario se calcula multiplicando los moles de contaminante adsorbido en el equilibrio por los moles totales que entrarían al lecho a lo largo de un ciclo entero; a su vez, el flujo molar de contaminantes por ciclo se calcula multiplicando el flujo molar del mismo por las horas de duración de un semiciclo de adsorción (que es de 12 horas de acuerdo a lo calculado en el apartado I.3.2.3.3.). A la masa de adsorbente calculada se le añadirá un 20% en exceso, como es habitual en este tipo de procesos (L. McCabe, C. Smith y Harriott 2007). Una vez calculada la masa de los lechos y teniendo en cuenta la densidad de los mismos (Tabla I.V), se puede determinar el volumen que ocuparán. Los resultados del cálculo se muestran en la Tabla I.X.

Tabla I.X. Masa de adsorbente necesaria para la eliminación completa de agua y dióxido de carbono y volumen de los lechos.

	Moles de contaminante por ciclo (mol/ciclo)	Masa adsorbente para saturación (kg)	20% en exceso	Volumen (m ³)
Alúmina	29 326.4	2 493.5	2 992.2	3.6
Zeolita 13X	3341.8	4 444.4	5 333.3	8.8
TOTAL	-	6 937.88	8 325.5	12.4

I.3.2.3.2. Cálculo de las dimensiones del equipo

Una vez calculada la masa necesaria de cada uno de los adsorbentes, se procede a calcular las dimensiones del equipo. El parámetro de diseño crítico es el área transversal del lecho, ya que la velocidad superficial del fluido a través del lecho debe estar entre 0.15 y

0.45 m/s, siendo 0.2 m/s un valor típico. Esto es la velocidad a la que el aire recorrería el lecho si no hubiese relleno. (L. Mc Cabe, C. Smith y Harriott 2007)

El volumen de los lechos no es muy grande, así que se diseñará un adsorbedor vertical. El flujo volumétrico durante la adsorción es de 2 676.1 m³/h, mientras que en la desorción es de 1 520.3 m³/h (ver sección I.3.2.3.5.). La velocidad superficial del fluido durante la desorción va a ser menor que durante la adsorción, así que fijando una velocidad superficial de desorción de 0.15 m/s se calcula un área de 2.82 m², lo cual corresponde a un cilindro de 1.89 m de diámetro interno. Se comprueba que la velocidad superficial durante la adsorción es de 0.26 m/s y que está dentro del intervalo.

Considerando los volúmenes de la Tabla I.X., se calcula la altura de adsorbente que deberían tener: 1.30 m para a alúmina y 3.11 m para la zeolita. Añadiendo un 10% de exceso de altura para permitir la separación entre lechos se obtiene que el equipo medirá 4.85 m. En la Tabla I.XI. se muestra un resumen de las dimensiones de los lechos. Cabe mencionar que para determinar la altura total del equipo es necesario añadirle la altura de los cabezales.

Para comprobar que el dimensionado de los lechos es adecuado se calcula la caída de presión a través de los mismos mediante la ecuación de Ergun (Ecuación I.13). (Heinz Brauner y Yamanchili B.B. Varma 1981)

$$\frac{\Delta p_b}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon_b)^2 \eta u}{\varepsilon_b^3 d_p} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_b) \rho u^2}{\varepsilon_b^3 d_p} \quad [I. 13]$$

Donde:

Δp_b : Caída de presión a través del lecho (Pa)

L : Longitud del lecho (m)

ε_b : Porosidad del lecho

η : Viscosidad del gas (Pa·s)

u : Velocidad superficial del gas a través del lecho (m/s)

d_p : Diámetro de partícula (m)

ρ : Densidad del gas (kg/m³)

Los datos referentes al lecho se pueden leer en la Tabla I.V. Por otro lado, la densidad del gas en las condiciones de adsorción es de 7.06 kg/m³ (considerando una humedad del 100%) («Aspen Hysys» 2025), y tanto la velocidad superficial del gas a través del lecho como la longitud del mismos son datos ya calculados. En la Tabla I.XI se muestra el cálculo de la caída de presión, y se comprueba que es aceptable.

Tabla I.XI. Dimensionado de los lechos.

	Diámetro (m)	Altura (m)	Caída de presión (Pa)
Alúmina activada	1.89	1.32	1176.0
Zeolita 13X	1.89	3.11	2764.5
Altura adicional	1.89	0.44	0
TOTAL	-	4.87	3940.5

I.3.2.3.3. Optimización del tiempo de ciclo

Según estudios realizados por Jacobs y colaboradores, la durabilidad de los adsorbentes depende simultáneamente de la frecuencia y la temperatura de regeneración, ya que los ciclos de calentamiento-enfriamiento producen microrroturas y disminución de porosidad en los adsorbentes (Jacobs et al. 2022; 2021). Por tanto, un lecho durará más cuanto menor sea la frecuencia de regeneración. Sin embargo, para conseguir esto es necesario utilizar lechos de gran tamaño, lo cual también tiene inconvenientes: en primer lugar, supondrán una mayor inversión en materiales; y, en segundo lugar, los costes de operación serán mayores ya que la caída de presión aumentará.

Para la realización la optimización, se fijarán distintos tiempos de adsorción a partir de los cuales se calcularán la pérdida de carga a través del lecho y el coste anual de los adsorbentes. La pérdida de carga se calculará considerando la altura que debería tener el equipo fijado un diámetro de 1.89 m, de acuerdo a lo calculado en el apartado I.3.2.3.2. Los costes anuales de los adsorbentes dependerán de la inversión inicial y la duración en años de los mismos. En uno de los estudios de Jacobs mencionado anteriormente, se estudió la pérdida de eficacia de la Zeolita 13X en función del número de ciclos para distintas temperaturas de regeneración, obteniéndose los resultados que se muestran en la Figura I.4. (Jacobs et al. 2021).

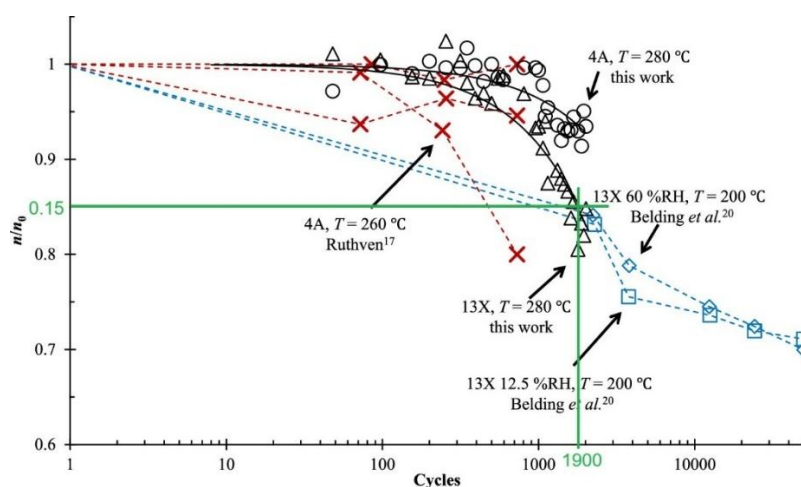


Fig. I.4. Estudio de la pérdida de eficacia de distintos tipos de zeolitas según el número de ciclos transcurridos a distintas temperaturas de regeneración. (Jacobs et al. 2021)

Para el cálculo de la masa de adsorbente necesario, se calculó un 20% en exceso sobre el valor de equilibrio. Por tanto, se considerará que la máxima pérdida de eficacia aceptable será de un 15% que, calculándolo sobre la masa de adsorbente, proporcionaría un valor similar al de equilibrio. Por tanto, se obtiene que la duración máxima de los adsorbentes será de 1900 ciclos. El número de ciclos anuales se calcula dividiendo las 7920 horas de funcionamiento anuales de la planta (330 días al año) entre la duración del ciclo en horas.

Cabe mencionar que estos cálculos son aproximados, ya que la temperatura de desorción del presente equipo y del estudio son diferentes. Por otro lado, solo se han encontrado estudios en referencia a la zeolita 13X, por lo que se supondrá que la alúmina activada tendrá un comportamiento similar.

Representando los aspectos previamente mencionados se obtiene la Figura I.5. Los valores calculados para la representación gráfica se encuentran tabulados en el Apéndice I-B (Tabla I-B.II.). Se observa que, cuanto mayor es el tiempo de operación de la adsorción, los gastos anuales en adsorbente disminuyen. Sin embargo, esto también supone un aumento en la pérdida de carga, lo cual se traduce en mayores costes de compresión. Por otro lado, cuanto mayor sea el lecho, el tamaño del equipo aumentará y con ello su coste.

Por tanto, se considerará que el óptimo se encuentra en las 12 horas. De esta manera el tiempo de ciclo completo será de 24 horas: un semiciclo de 12 horas para la adsorción y otro para la desorción. Para este tiempo de ciclo se obtiene que los adsorbentes serán sometidos a 330 ciclos anualmente, lo cual proporciona una duración de 5 años y 9 meses. El mantenimiento de la planta es anual; por tanto, los adsorbentes serán cambiados cada 5 años, tras 1650 ciclos de uso y una pérdida de eficacia de entrono al 13% (Figura I.4.). En la Figura I.6 se muestra un esquema de los dos equipos usados para realizar los semiciclos de adsorción-desorción.

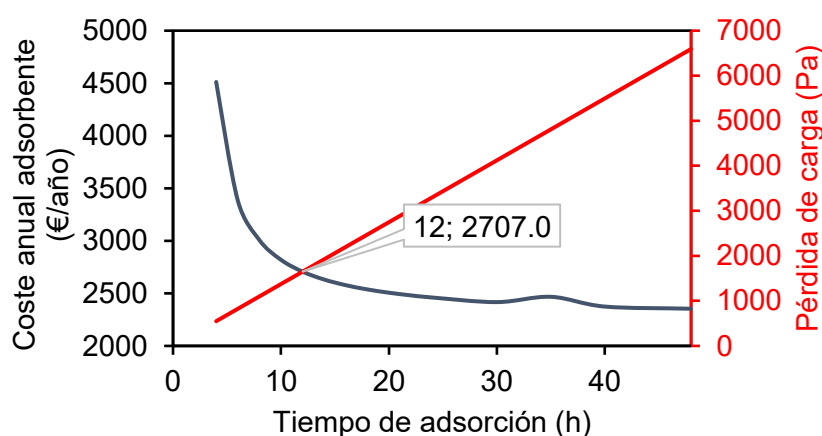


Fig. I.5. Optimización del tiempo de adsorción (tiempo de ciclo) en base al coste anual de los adsorbentes (línea gris) y de la pérdida de carga (línea roja)

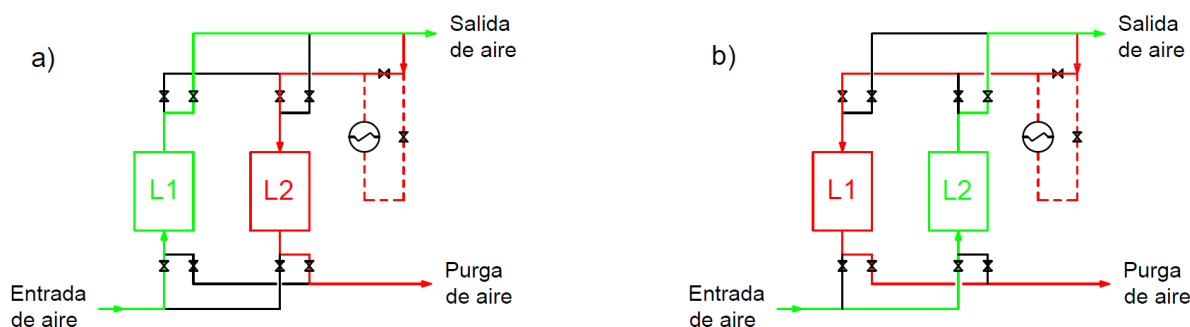


Fig. I.6. Esquema del ciclo de adsorción. En verde la adsorción, en rojo la desorción. La línea punteada indica el trayecto en la etapa de calentamiento. a) 0 a 12 horas, b) 12 a 24 horas. (Elaboración propia)

I.3.2.3.4. Cálculo del tiempo de saturación

Para calcular el tiempo de saturación se utilizará la Ecuación I.14.

$$t^* = \frac{L\rho_b(W_{sat} - W_0)}{uc_0} \quad [I.14]$$

Donde:

t^* : Tiempo de saturación (s). Se considera la saturación del lecho cuando $c/c_0=0.5$

ρ_b : Densidad del lecho (kg/m^3)

W_{sat} : Carga de adsorbato en sólido en equilibrio ($\text{kg}_{\text{adsorbato}}/\text{kg}_{\text{adsorbente}}$)

W_0 : Carga de adsorbato en el sólido al inicio del ciclo ($\text{kg}_{\text{adsorbato}}/\text{kg}_{\text{adsorbente}}$)

u : Velocidad superficial del gas (m/s)

c_0 : Concentración inicial del contaminante en el gas (kg/m^3)

$$c_0 = \frac{c_{PPMV} \cdot PM \cdot P_{op}}{10^6 \cdot R \cdot T_{op}} \quad [I.15]$$

Para el cálculo de la carga de adsorbato en el sólido al inicio del ciclo es necesario aplicar la ecuación de la isoterma de Langmuir (Ecuación I.11) en las condiciones de desorción, pues es la cantidad de cada uno de los contaminantes que quedará aún en el lecho al inicio del siguiente ciclo. Sin embargo, será necesario aplicarles un cambio de unidades de acuerdo a la Ecuación I.16. En la Tabla I.XII. se presentan todos los resultados del cálculo.

$$W = \frac{q \cdot PM}{1000} \quad [I.16]$$

Tabla I.XII. Cálculos para calcular el tiempo de saturación de cada uno de los lechos

	Alúmina	Zeolita 13X
Longitud del lecho L (m)	1.32	3.11
Densidad lecho ρ_b (kg/m ³)	820	609
Carga en saturación W_{sat} (kg/kg)	0.212	0.039
Carga al inicio del ciclo W_0 (kg/kg)	$3.95 \cdot 10^{-6}$	$1.33 \cdot 10^{-4}$
Velocidad superficial u (m/s)	0.264	0.264
Concentración inicial de contaminante c_0 (kg/m ³)	$1.44 \cdot 10^{-2}$	$5.15 \cdot 10^{-3}$
Tiempo t (h)	15.1	15.1

Se observa que en ambos casos el tiempo de saturación es superior al tiempo de operación, con un margen de 3.1 horas. Por tanto, el diseño se considera adecuado.

1.3.2.3.5. Cálculo de las etapas de desorción

Para realizar un cálculo óptimo de las etapas de desorción sería necesario hacer una simulación de la evolución de la temperatura del lecho con respecto del tiempo. Para ello hay que resolver los balances de energía al gas, el lecho y la carcasa, los cuales están constituidos por múltiples ecuaciones diferenciales de una complejidad que excede los límites de este trabajo. Por tanto, el diseño de la desorción se hará en base a trabajos disponibles en la literatura.

De acuerdo a la bibliografía, la purga constituye aproximadamente un 10% de la producción de aire de alimentación (Kumar et al. 2003b). Esta debe ser calentada hasta una temperatura suficiente para desorber los lechos. La temperatura de desorción de los adsorbentes puede cambiar según el proveedor; por ejemplo, según un proveedor chino la alúmina activada se debe regenerar a una temperatura de entre 170 y 230 °C (Xiangrun. Production of sorbents and catalyst). Por otro lado, los estudios de degradación para la zeolita 13X sugieren un rango de temperaturas para la desorción de entre 180 y 400 °C (Jacobs et al. 2022).

Recordando lo mencionado anteriormente, la eficacia de los adsorbentes se mantiene mejor cuanto menor sea la temperatura de desorción (Jacobs et al. 2022; 2021). Además, una menor temperatura supone menores gastos de calentamiento. Por tanto, se considera que 180 °C es una temperatura de entrada adecuada para el gas de purga en la etapa de calentamiento.

Una vez finalizada la etapa de calentamiento es necesario hacer pasar aire frío para devolver al lecho a la temperatura de operación en la etapa de adsorción. Finalmente, se

inyecta aire para devolver al lecho a la presión de 5.55 bar. El diseño del cronograma para cada una de las etapas se ha realizado en base a datos de la bibliografía, y se muestra en la Tabla I.XIII. (Zhang y Wang 2013).

Tabla I.XIII. Cronograma de un ciclo de adsorción completo. DP: Despresurización, C: Calentamiento, F: Enfriamiento, PR: Presurización.

Semiciclo	Duración	Lecho 1	Lecho 2
1	5 min	ADSORCIÓN	DP
	4 h 30 min		C
	7 h 10 min		F
	15 min		PR
2	5 min	DP	ADSORCIÓN
	4 h 30 min	C	
	7 h 10 min	F	
	15 min	PR	

La desorción se realiza en sentido contrario a la adsorción, con el objetivo de que la zona de transferencia de masa (MTZ) retroceda a lo largo del lecho sin cambiar su forma. El aire utilizado para hacer la desorción procede de hacerle un sangrado al flujo de salida de la etapa de adsorción. Este sangrado será del 10% del flujo de entrada, de acuerdo a la bibliografía (Kumar et al. 2003b).

El flujo másico de entrada de aire en la columna es de 18 881.5 kg/h; por tanto el flujo másico de purga será de 1 888.1 kg/h. Considerando una densidad del aire de 0.8 kg/m³ en la etapa de calentamiento (1 atm, 180°C, 0% humedad) («Aspen Hysys» 2025), se determina que el flujo de desorción será de 2370.7 m³/h, y la velocidad superficial del aire a través del lecho es de 0.23 m/s.

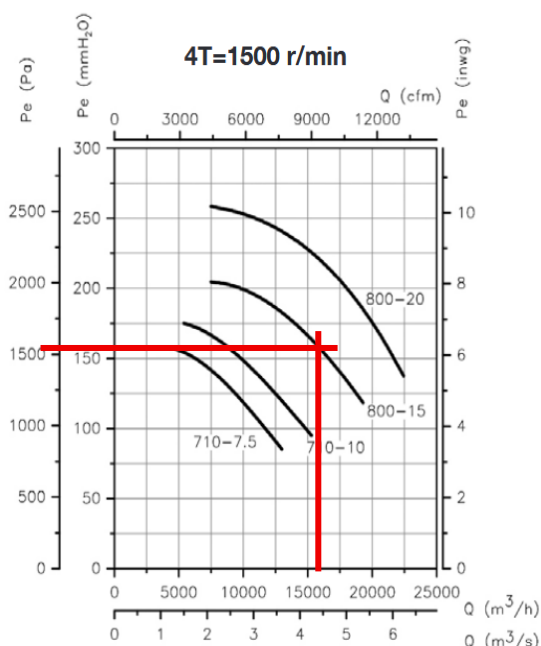
Se realiza el mismo cálculo para la etapa de enfriamiento; dado una densidad de 1.24 kg/m³ para la etapa de enfriamiento (1 atm, 15 °C), se determina que el flujo a través del lecho será de 1520.2 m³/h, y la velocidad superficial del aire a través del lecho es de 0.15 m/s.

I.3.2.4. Equipos auxiliares

I.3.2.4.1. Ventilador V-I.1

El caudal que hay que impulsar es de 15 207.9 m³/h, para lo que se ha seleccionado el ventilador comercial CASB-800-4T-15 IE3 de la marca Sodeca, que es capaz de impulsar un caudal máximo de 19 300 m³/h y requiere una potencia instalada de 11 kW. Consultando la curva característica del ventilador proporcionada por el fabricante, se determina que para el caudal de trabajo el ventilador es capaz de suministrar una presión de poco más de 1 500 Pa, que se espera que sean suficientes para suplir la pérdida de carga del filtro F-I.1 y

las pérdidas de carga por fricción. De no ser así, sería necesario seleccionar un ventilador de mayor potencia. (Sodeca).



Velocidad: 1470 rpm

Intensidad máxima admisible:

- 20.9 A a 400 V
- 12.10 A a 690V

Potencia instalada: 11 kW

Caudal máximo: 19 300 m³/h

Nivel de Presión Sonora: 76 dB

Peso aproximado: 421 kg

Fig. I.7. Curva característica y especificaciones del ventilador V-I.1. (Sodeca). Las líneas rojas muestran las condiciones de trabajo del ventilador.

I.3.2.4.2. Compresor CP-I.1

Es necesario llevar la corriente gaseosa desde una presión depresión atmosférica hasta una presión de 5.55 bar; en pascales 101 325 y 555 000 Pa respectivamente. La mayoría de compresores industriales son adiabáticos, así que se aplicarán las ecuaciones I.17 y I.18 para el cálculo del trabajo, donde T y P son temperatura y presión respectivamente (el subíndice 1 indica las condiciones de entrada y el 2 las condiciones de salida), R la constante de los gases ideales y γ el factor de expansión, que para gases diatómicos es 1.4.

$$T_2 = T_1 \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad [I.17]$$

$$W = R \frac{T_2 - T_1}{\gamma - 1} \quad [I.18]$$

Considerando una temperatura de entrada de 288 K (15 °C), se calcula que la temperatura de salida es de 468 K (195 °C), lo cual entra dentro de lo aceptable de acuerdo a las reglas heurísticas de Couper y colaboradores (Couper, Penney y Walas 2010). Al sustituir los valores en la Ecuación I.18 se obtiene un trabajo de 3.751 kJ/mol. Considerando un flujo molar de 181.2 mol/s, se calcula que el trabajo de compresión que se debe realizar es de 678 kW.

Para realizar la adsorción es necesario bajar la temperatura del gas nuevamente hasta los 15 °C. Dado que a lo largo del proceso hay varias corrientes precisarán de aporte energético para aumentar su temperatura, aprovechará la energía térmica de esta corriente para hacer la integración energética.

1.3.2.4.3. Compresión CP-I.2 y CP-I.3

En la sección II es necesario realizar una serie de expansiones con el fin de obtener suficiente frío para hacer la destilación criogénica del aire. Para ello es necesario comprimir el gas hasta una presión de 40 atm ($4.053 \cdot 10^6$ Pa). Considerando una temperatura de entrada de 288 K y una presión inicial de 555 kPa, se calcula la temperatura de salida del gas, empleando nuevamente las ecuaciones I.17 y I.18, resultando una temperatura de salida de 235 °C, lo cual es superior a lo recomendado por las reglas heurísticas previamente mencionadas (lo máximo son 204 °C, o 400 °F). Por tanto, será necesario hacer más de una etapa de compresión. Dado que la temperatura de salida, calculada para una única etapa de compresión, no es muy superior a la máxima recomendada (hay una diferencia de 31 °C), se ha decidido que dos etapas de compresión serán suficientes.

El cálculo de la relación de compresiones en cada etapa se calcula de acuerdo a la Ecuación I.19, donde α es la relación de compresión y N representa el número de etapas. El resto de términos ya han sido definidos. Por tanto, se obtiene una relación de compresiones de 2.7.

$$\alpha = \left(\frac{P_N}{P_1} \right)^{\frac{1}{N}} \quad [I.19]$$

El resto de cálculos se realizan según las ecuaciones I.17 y I.18, sustituyendo el término P_2/P_1 por α (que es 2.7). Considerando una misma temperatura de entrada (T_1), la diferencia de temperaturas durante la compresión depende únicamente de la relación de compresión; al ser igual en ambos casos se espera que la diferencia de temperaturas, y por tanto el trabajo en las dos etapas sea idéntico. Haciendo los cálculos se obtiene un trabajo de 1.966 kJ/mol para cada una de las dos etapas. Considerando las dos etapas y que el flujo molar es de 181.2 mol/s se obtiene un trabajo de 712 kW. Al igual que en el caso anterior, el calor en exceso de esta corriente se puede aprovechar para calentar otras corrientes del proceso, a través de la integración energética del mismo.

1.3.2.4.4. Cambiador C-I.2.

Es necesario calentar el aire que sale de la etapa de adsorción a 15 °C, hasta 180 °C, que es la temperatura a la que se realiza el proceso de desorción térmica. Para ello se empleará un cambiador de calor en el que el calor intercambiado puede estimarse a partir de la ecuación I.20.

$$Q = \dot{m}_{aire} c_p \Delta T \quad [I.20]$$

Donde $\dot{m}_{aire}$ es el flujo de aire a tratar, en este caso 1 888.8 kg/h, c_p es la capacidad calorífica, que para el aire es de 1.032 kJ/(kg °C) (Zhang y Wang 2013). ΔT es la diferencia de temperaturas entre la entrada y la salida del fluido, que es 165 °C. Por tanto, se obtiene que el calor que se debe intercambiar es de 89.3 kW.

A continuación, se debe calcular el área de intercambio. Para ello se aplicará la ecuación I.21, donde U es el coeficiente global de transmisión de calor, A el área de intercambio de calor y ΔT_{ml} la diferencia de temperaturas expresada como la media logarítmica entre los dos fluidos.

$$Q = UA\Delta T_{ml} \quad [I.21]$$

La diferencia de temperatura expresada como media logarítmica se calculará considerando que se va a usar vapor vivo a 190 °C como agente calefactor. Para ello se aplica la expresión de la ecuación I.22.

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} \quad [I.22]$$

Donde ΔT_1 y ΔT_2 representan la diferencia de temperaturas entre los dos fluidos en un extremo u otro del cambiador. Considerando que los dos fluidos fluyen en contracorriente, al realizar los cálculos se obtiene que la diferencia de temperaturas media logarítmica es de 57.6 °C.

El coeficiente global de transferencia de masa se calcula considerando que la resistencia que ejerce la pared metálica entre ambos fluidos es despreciable; por tanto, las dos resistencias a la transferencia de materia serán:

- Coeficiente individual de transferencia de calor por convección para cambio de fase: 2500 W/(m² °C) (Incropera 2013)
- Coeficiente individual de transferencia de calor por convección para gases: 100 W/(m² °C) (Incropera 2013)

El coeficiente global se calculará de acuerdo a la ecuación I.23, obteniéndose un valor de 96.2 W/(m² °C). Finalmente se despeja el área en la ecuación I.21, obteniéndose un valor de 16.12 m².

$$U = \left(\frac{1}{h_{servicio}} - \frac{1}{h_{aire}} \right)^{-1} \quad [I.23]$$

Dado el valor obtenido para el área de intercambio, se decide que la mejor opción es un cambiador de carcasa y tubo. El material del mismo será acero inoxidable 304, de uso frecuente para construir cambiadores de calor; es importante que sea acero inoxidable ya que uno de los lados estará en contacto con vapor de agua condensante, por lo que debe tener alta resistencia a la corrosión.

Cabe mencionar que para conseguir vapor vivo a tal temperatura es necesario alcanzar una presión de 1 254.4 kPa (Incropera 2013). El aire que se desea calentar estará a una atmósfera de presión, así que, siguiendo las reglas heurísticas de diseño (Couper, Penney y Walas 2010) el fluido que irá por el interior de los tubos será el vapor vivo, mientras que el aire circulará por la carcasa.

Por último se calcula el flujo másico de vapor vivo necesario, para lo cual se aplica la Ecuación I.24, donde λ representa la entalpía de vaporización, que es 1 979 kJ/kg (Incropera 2013); el resto de términos ya han sido definidos. A partir del calor calculado con la ecuación I.20 se calcula un flujo másico de 0.045 kg/s. La etapa de calentamiento dura 3/8 del tiempo total de desorción, por lo que el flujo másico anual de vapor vivo requerido es de 482 740 kg/año.

$$Q = \dot{m}_{vapor} \lambda \quad [I.24]$$

1.3.2.4.5. Cambiadores de refrigeración: C-I.1, C-I.3 y C-I.4

Las corrientes de salida de las compresiones pueden ser aprovechadas energéticamente para realizar la integración energética que se muestra en el capítulo 7. Sin embargo, debido al elevado número de corrientes del proceso y que hay múltiples topologías que podrían ser correctas se ha decidido hacer los cálculos de servicios auxiliares como si no hubiera integración energética. De esta manera, al valorar las distintas topologías de cambiadores es posible usar este cálculo como base.

Por tanto, los cambiadores tienen como función enfriar hasta los 15 °C las corrientes de aire que han sufrido compresiones adiabáticas. Como agente refrigerante se utilizará amoniaco, dado su fácil acceso por ser el principal producto que se genera en la planta. Para realizar los cálculos se aplicarán las ecuaciones I.21 a I.24 tal y como se ha descrito

anteriormente, obteniéndose los resultados que se recogen en la Tabla I.XIV de manera resumida. En el Apéndice I-B (Tabla I-B.III) se pueden ver los datos y cálculos completos.

El amoníaco a temperatura ambiente es un gas, pero se desea utilizar como refrigerante en forma líquida. Para ello se ha escogido una presión de trabajo de 10 bar; a esta presión la temperatura de ebullición del amoníaco es, aproximadamente 25 °C, tal y como se puede ver en la Figura I-B.5 del Apéndice I-B. La temperatura de salida del amoníaco en los tres casos es 20 °C, de tal manera que si hubiera pequeñas fluctuaciones en la temperatura de salida el gas no se evaporaría. La temperatura de entrada debe ser lo más baja posible para que el área de intercambio sea mínima, llegando a un compromiso que no implique un aumento excesivo del coste asociado. Para gases, una diferencia de temperaturas de 20 °C resulta adecuada (Smith 2016), así que la temperatura de entrada del amoníaco será de -5 °C.

Tabla I.XIV. Parámetros de diseño de los cambiadores de calor C-I.1, C-I.3 y C-I.4

	$\dot{m}_{aire}$ (kg/s)	$\dot{m}_{NH_3}$ (kg/s)	T_e (°C)	U (W/m ² °C)	ΔT_{ml} (°C)	Q (kW)	A (m ²)
C-I.1	5.2	12.8	195	96.2	71.5	975.6	150.08
C-I.3	5.2	6.7	109	90.9	46.4	512.2	121.40
C-I.4	5.2	6.7	109	90.9	46.4	512.2	121.40

El amoníaco es un líquido bastante corrosivo, por lo que el material más adecuado para la construcción del equipo es acero inoxidable 316 (Peters, Timmerhaus y West 2003). Por el mismo motivo, se aconseja que el amoníaco circule por el interior de los tubos.

I.4. DISEÑO MECÁNICO

I.4.1. DISEÑO MECÁNICO DE LA TORRE DE ADSORCIÓN

Se ha seleccionado la torre de adsorción para hacer el diseño mecánico, al considerarse el equipo más importante de esta sección. La máxima temperatura de operación es de 443 K, lo cual entra dentro del rango de temperaturas moderadas cuando se trata de trabajar con aceros. Por otro lado, *a priori* la columna no trabajará con sustancias corrosivas ni tampoco agua líquida. Por tanto, un acero al carbono SA-285, Gr.C resulta adecuado, ya que es un material barato y tiene una elevada resistencia mecánica. (Peters, Timmerhaus y West 2003)

En cuanto a los cabezales de la columna, estos deben ser capaces de soportar las tensiones durante los ciclos de compresión y descompresión; por tanto, pese a que los cabezales toro esféricos son más baratos y fáciles de trabajar, los cabezales elipsoidales 2:1 resultan más adecuados. (Lawate y Deshmukh 2015)

Para determinar el grosor de las paredes es necesario aplicar el código ASME de acuerdo a la Ecuación I.25 para carcassas cilíndricas y la Ecuación I.26 para cabezales elipsoidales.

$$t = \frac{Pr_i}{SE_j - 0.6P} + C_c \quad [I.25]$$

$$t = \frac{PD_a}{2SE_j - 0.2P} + C_c \quad [I.26]$$

Donde (**solo aplicable al código ASME**):

t : Grosor de la pared del equipo (m)

P : Presión manométrica de operación (kPa)

S : Máxima presión de trabajo (kPa)

E_j : Eficacia de junta expresada como fracción

C_c : Margen de grosor por corrosión (m)

r_i : Radio interno de la carcasa antes de la adición del margen por corrosión (m).

D_a : Diámetro del eje mayor de la cabeza elipsoidal antes de la adición del margen por corrosión (m)

La presión manométrica de operación es de 454 kPa, y la máxima presión de trabajo para el acero seleccionado es de 57 200 kPa para la máxima temperatura que se alcanza

durante la desorción. Se considerará que las juntas han sido totalmente radiografiadas, así que la eficacia de junta será de 1. De acuerdo a las reglas heurísticas para el diseño de equipos a presión, se considerará un margen de grosor por corrosión de 0.38 cm (0.15 in), ya que las condiciones de la torre de adsorción no son corrosivas. Por otro lado, D_a corresponde al diámetro calculado de la columna (1.89 m) y r_i al radio (0.95 m). (Peters, Timmerhaus y West 2003)

Finalmente se calcula:

- Grosor de la pared cilíndrica: 0.01136 m
- Grosor de los cabezales elipsoidales: 0.01133 m

Todo el equipo debe tener el mismo grosor, así que se seleccionará el grosor del elemento de mayor tamaño, que es la pared cilíndrica, y se redondeará hacia arriba ya que las láminas de acero industriales son comercializadas en grosores estándar. Se obtiene que el grosor de pared es de 1.2 cm (0.012 m).

I.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA

I.5.1. EQUIPOS

La valoración económica de los equipos se ha realizado empleando diversas ecuaciones y gráficos obtenidos del Petes et al. (Peters, Timmerhaus y West 2003), que permiten calcular su coste en base a alguno de los parámetros característicos de diseño. Cabe considerar que algunas de estas ecuaciones y figuras, mostradas en el Apéndice I-B, fueron elaboradas en los años 2002 y 2003; como consecuencia de la inflación, los precios han ido aumentando, por lo que será necesario emplear el valor de CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index), que permite ajustar los precios entre periodos de acuerdo a la Ecuación I.27.

$$Precio_{año\ y} = \frac{CEPCI_{año\ y}}{CEPCI_{año\ x}} \cdot Precio_{año\ x} \quad [I. 27]$$

Los valores de CEPCI que se utilizarán son:

- 786.7 en febrero de 2025 («Chemical Engineering» 2014)
- 402.3 en 2003 («Chemical Engineering» 2014)
- 390.4 en 2002 («Chemical Engineering» 2014)

Por otro lado, esas mismas tablas y gráficas proporcionan valores en dólares. Para realizar el cambio a euros se va a utilizar el valor de cambio del Banco Central Europeo, que establecía que el 18 de junio de 2025 1 € equivale a 1.1508 \$. De manera simplificada se asumirá que 1 \$ equivale a 0.87 €.

I.5.1.1. Ventilador V-I.1

El precio del ventilador seleccionado (modelo "CASB-800-4T-15 IE3" de la marca Sodeca) tiene un precio de compra de 7 418.3 € (presupuesto realizado por el proveedor a solicitud propia) sin incluir Iva ni envío.

I.5.1.2. Filtros de bolsas (F-I.1, F-I.2 y F-I.3)

De acuerdo a los cálculos realizados con anterioridad, son necesarios 3 filtros. El precio de cada uno de ellos es de 234.04 € (según información suministrada por el proveedor), por lo que el precio total para este equipo es de 702.12 € sin IVA ni envío.

I.5.1.3. Compresores CP-I.1 y CP-I.2

Para el cálculo del precio de los compresores se han aplicado unas ecuaciones I.28 y I.29 extraídas del libro de Petes y colaboradores (Peters, Timmerhaus y West 2003), desarrolladas en 2003 y donde C representa los costes en k\$ y HP la potencia en caballos; la primera de las ecuaciones es para para compresores recíprocos sin eje impulsor, y la segunda de ellas es para para compresor de tornillo con eje impulsor. En la Tabla I.XV se muestran los cálculos realizados, considerando que un kW equivale a 1.34 caballos (O. Levenspiel 1996).

$$C = 7.19(HP)^{0.61} \quad \text{Aplicable para } 100 < HP < 20\,000 \quad [I.28]$$

$$C = 1.81(HP)^{0.71} \quad \text{Aplicable para } 10 < HP < 800 \quad [I.29]$$

Tabla I.XV. Cálculo de costes de los compresores

Equipo	Potencia (kW)	Potencia (HP)	Ecuación	Precio (k\$, 2003)	Precio (M\$, 2025)	Precio (M€, 2025)
CP-I.1	678	909	I.28	458.57	0.898	0.781
CP-I.2	356	477	I.29	144.39	0.283	0.246
CP-I.3	356	477	I.29	144.39	0.283	0.246

I.5.1.4. Separador de fases S-I.1

Para calcular el precio del separador de fases se utiliza la Figura I-B.I del Apéndice I-B. Originalmente la figura sirve para estimar los costes de colectores de polvo húmedo; sin embargo, es aplicable al separador de fases diseñado gracias a la similitud de construcción entre ambos.

Utilizando la isolínea de “Gravity spray scrubber”, y considerando un flujo volumétrico de aire de 0.7 m³/s (a 15 °C y 555 kPa) se obtiene un precio estimado de 2100 \$ en 2002, sin transporte ni impuestos. Aplicando la ecuación I.27 y considerando el cambio a euros se obtiene un precio de 3680 €.

I.5.1.5. Adsorbedores AD-I.1

Considerando las dimensiones del equipo previamente calculadas, una densidad del acero de 7850 kg/m³ (eFunda. Engeneering Fundamentals) y un precio por tonelada de acero de 587.4 € (Alibaba) (aunque puede cambiar según el distribuidor), se puede calcular el precio del acero necesario para construir cada una de las columnas. Para ello, hay que calcular el peso de cada una de las columnas aplicando las ecuaciones I.30 y I.31 (Peters, Timmerhaus y West 2003) en las que **se aplica la nomenclatura del código ASME**.

$$W_{\substack{\text{cabezal} \\ \text{2:1 elipsoidal}}} = \rho_m \cdot \frac{\pi(nD_a + t)^2 t}{4} \quad [\text{I. 30}]$$

$$W_{\substack{\text{pared} \\ \text{cilíndrica}}} = \rho_m t \pi \cdot \frac{D_a^2}{4} \quad [\text{I. 31}]$$

Donde W representa el peso del equipo en kg, ρ_m es la densidad del material en kg/m³ y n es un parámetro de corrección que depende del diámetro, y que para este caso vale 1.21; el resto de términos ya han sido definidos.

Además, al coste de la carcasa hay que sumarle el precio de los adsorbentes que constituyen los lechos de adsorción. Nuevamente, el precio de este material depende del proveedor. Consultando en internet, se ha encontrado que el precio para la zeolita 13X es de 2.47 €/kg, y para la alúmina activada es de 1.01 €/kg (IndiaMART). Por tanto, considerando la masa de adsorbente calculado en el apartado I.3.2.3.1 se puede calcular la inversión inicial que hay que realizar para adquirir el equipo de adsorción al completo; los cálculos se muestran ver en la Tabla I.XVI.

Tabla I.XVI. Cálculo del peso y del precio del equipo de adsorción

	Peso (kg)	Precio (€)
Cabezales	784.7	460.93
Pared cilíndrica	2 727.4	1 602.00
Columna	3 512.1	2 062.92
Total de equipos	7 024.2	4 125.85
Alúmina activada	3 037.1	3 067.46
Zeolita 13 X	5 331.4	13 168.66
Total de adsorbentes	8 368.5	16 236.12

I.5.1.6. Cambiadores de calor:

Una vez determinada el área necesaria se hace uso de la Figura I-B.2 del Apéndice I-B para la estimación del coste de los cambiadores de calor empleados en esta Sección del proceso. La gráfica sirve para estimar el coste en de los equipos en \$ del 2002, así que es necesario primero aplicar la ecuación I.27 para hacer la conversión al valor actual y después aplicarle el cambio de moneda. Los cálculos se recogen en la Tabla I.VII.

Tabla I. XVII. Cálculo del precio para cambiadores de calor

	Área (m ²)	Coste (2003, \$)	Coste (2025, \$)	Coste (2025, €)
C-I.1	150.0	2 400	4 700	4 090
C-I.2	16.1	5 671	11 100	9 660
C-I.3	121.4	2 204	4 310	3 750
C-I.4	121.4	2 204	4 310	3 750

El cambiador C-I.1 tiene como función enfriar el aire de salida del compresor CP-I.1, que está a 555 kPa, desde los 195 °C hasta los 15 °C. Para ello se utiliza amoníaco líquido a 1 000 kPa de presión. Por tanto, cambiador debe construirse empleando como material acero inoxidable 316, y el factor de corrección para la presión es de 1.

El cambiador C-I.2 tiene como función calentar el aire de purga para realizar la desorción térmica de los lechos de adsorción. Debe calentar el aire, que está a presión atmosférica, desde 15 °C hasta 180 °C utilizando vapor vivo a una presión de más de 1 200 kPa. Por tanto, el material del cambiador será acero inoxidable 304, y el factor de corrección de presión 1.07.

Los cambiadores C-I.3 y C-I.4 son idénticos, ambos tienen como función enfriar el aire de salida del compresor previo (CP-I.2 y C-I.3 respectivamente) desde 105 hasta 15 °C. La diferencia es que el primero trabaja a una presión de 1 498.5 kPa y el segundo a 4 053 kPa, pero en ambos casos se utiliza como refrigerante amoníaco a 1 000 kPa de presión. Por tanto, nuevamente, el material debe ser acero inoxidable 316, y el factor de corrección para la presión es de 1.16.

I.5.2. CONSUMIBLES

I.5.2.1. Vapor Vivo

El cambiador C-I.2 requiere un flujo másico de vapor de 0.045 kg/s. Considerando que la planta trabaja 24 h al día, 330 días al año, y que el calentamiento solo es requerido 3/8 del tiempo de ciclo (4 horas y 30 minutos de cada 12 horas), se calcula que las necesidades de vapor vivo son de 482 569 kg/año.

I.5.2.2. Refrigerante (amoníaco)

Sumando las necesidades de amoníaco de los tres cambiadores de calor, se obtiene que se necesitan 26.2 kg/s de amoníaco. Estos cambiadores trabajan en continuo en un circuito cerrado; las pérdidas de refrigerante en sistemas industriales de estas características se estiman en un 7% anual (Merz et al. 2005). No es posible conocer la masa exacta de refrigerante que contiene el sistema, así que para estimar las pérdidas de refrigerante se va a suponer de forma arbitraria que el sistema completo tenga suficiente amoníaco para suplir las necesidades de refrigeración durante 15 minutos, esto son 23 599 kg de amoníaco.

Considerando el 7% de pérdidas, se estima que las necesidades de amoníaco son de 1652 kg/año, lo que supone una cantidad despreciable frente a las 116 000 ton/año que produce la planta.

I.5.2.3. Electricidad

En la Tabla I.VIII se muestra el consumo eléctrico de los equipos de impulsión principales. El consumo eléctrico del ventilador viene determinado por la ficha técnica, tal y como se indica en la Figura I.7. Por otro lado, el consumo eléctrico de los compresores viene determinado por el trabajo de compresión necesario (calculado en el apartado I.3.2.4.3) y la eficacia de cada tipo de compresor. El compresor CP-I.1 es de tipo alternativo, y su eficacia máxima típica es del 80 %; por otro lado, los compresores CP-I.2 y CP-1.3 son de tipo tornillo rotativo, cuyas eficacias máximas típicas son también del 80%. (Peters, Timmerhaus y West 2003).

Tabla I.XVIII. Consumo eléctrico de los equipos de impulsión de gases de la Sección I.

	Potencia requerida (kW)	Consumo anual (MWh/año)
V-I.1	11	87.1
CP-I.1	848	6 714.6
CP-I.2	445	3 525.4
CP-I.3	445	3 525.4
TOTAL	1 749	13 852.9

I.5.2.4. Mantenimiento de los lechos

Los sólidos de los lechos de adsorción pueden regenerarse y ser empleados durante varios ciclos, por lo que no son un consumible como tal. Sin embargo, dado que es necesario reemplazarlos cada cierto tiempo, se consideran dentro de los gastos de operación. Para ello, se estima el coste de rellenar los lechos y el tiempo de vida útil de los mismos, y se divide el coste de adquisición entre los años de vida útil, como si fuese un tipo de amortización estática.

Tal y como se mencionó anteriormente, cada una de las torres de adsorción debe contener 3 037.1 kg de alúmina activada y 5 331.4 kg de zeolita 13X, los cuales tienen una vida útil de aproximadamente 5 año. Por tanto, transcurrido ese tiempo será necesario hacer una nueva inversión. El coste total de los lechos actualmente se estima en 16 236.12 € que, dividida en los 5 años de vida útil, suponen 6 494.45 € anualmente.

I.6. BIBLIOGRAFÍA

AHN, H. y LEE, C.-H., 2004. Effects of capillary condensation on adsorption and thermal desorption dynamics of water in zeolite 13X and layered beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 59, no. 13, pp. 2727-2743. ISSN 00092509. DOI 10.1016/j.ces.2004.04.011.

ALIBABA, [sin fecha]. Hoja De Acero Al Carbono 285, Placa De Acero Al Carbono 285 - Buy A285 Grade C Plate astm Grade A285 C Carbon Steel Sa285 Grade A Astm A285 Gr.c Carbon Steel Plate a285 Grade C And A516 Grade 70 Astm A285 C Carbon Steel Boiler Plate Product on Alibaba.com. *www.alibaba.com* [en línea]. [consulta: 19 mayo 2025]. Disponible en: https://www.alibaba.com/product-detail/ASTM-A285-Grade-C-Materi-SA285_1600856988391.html.

ALQALLAF, J., ALI, N., TEIXEIRA, J.A. y ADDALI, A., 2020. Solid Particle Erosion Behaviour and Protective Coatings for Gas Turbine Compressor Blades—A Review. *Processes*, vol. 8, no. 8, pp. 984. ISSN 2227-9717. DOI 10.3390/pr8080984.

Aspen Hysys, 2025. 2025. S.I.: AspenTech.

ATLAS, W., [sin fecha]. Yearly & Monthly weather - Gijón, Spain. *Weather Atlas* [en línea]. [consulta: 29 abril 2025]. Disponible en: <https://www.weather-atlas.com/en/spain/gijon-climate>.

AYUNTAMIENTO DE GIJÓN, 2023. *Calidad del aire en Gijón /Xixón. Niveles de inmisión de los contaminantes atmosféricos* [en línea]. S.I.: s.n. [consulta: 19 abril 2025]. Disponible en: <https://drupal.gijon.es/sites/default/files/2024-02/Memoria%20Red%20Aire%202023.pdf>.

Chemical Engineering. *Chemical Engineering* [en línea], 2014. [consulta: 19 junio 2025]. Disponible en: <https://www.chemengonline.com/pci-home/>.

COUPER, J.R., PENNEY, W.R. y WALAS, S.M., 2010. *Chemical Process Equipment*. S.I.: Elsevier. ISBN 978-0-12-396959-0.

EFUNDA. ENGINEERING FUNDAMENTALS, [sin fecha]. eFunda: Properties of Carbon Steel ASTM A285 Grade C. [en línea]. [consulta: 19 mayo 2025]. Disponible en: https://www.efunda.com/materials/alloys/carbon_steels/show_carbon.cfm?ID=ASTM_A285_GradeC&Page_Title=ASTM+A285+Grade+C&show_prop=all&utm_source=chatgpt.com.

GOBIERNO DEL PRINCIPADO DE ASTURIAS, 2022. *Calidad del Aire en Asturias (2022)*. España: s.n.

HEINZ BRAUNER y YAMANCHILI B.B. VARMA, 1981. *Air Pollution Control Equipment*. S.I.: s.n. ISBN 0-387-10463-1.

INCROPERA, F.P., 2013. *Foundations of heat transfer: Frank P. Incropera ... [et al.]* [en línea]. Singapore: John Wiley. [consulta: 29 mayo 2025]. ISBN 978-1-118-65358-6. Disponible en: <https://research.ebsco.com/linkprocessor/plink?id=4b02d4e8-ab66-30b0-8506-ee8e6a427b57>.

INDIAMART, [sin fecha]. Activated Alumina Desiccant - IndiaMART Export. [en línea]. [consulta: 30 mayo 2025]. Disponible en: https://export.indiamart.com/search.php?ss=activated%20alumina%20desiccant&tags=res:R C3|ktp:N0|stype:attr=1|mtp:S|wc:3|qr_nm:gd|cs:14487|com-cf:nl|ptrs:na|mc:21281|cat:132|qry_tpy:P|lang:en|rtn:0-0-0-0-1-7-2|qrd:250529|mrd:250529|prdt:250530.

JACOBS, J.H., DEERING, C.E., LESAGE, K.L., STASHICK, M.J. y MARRIOTT, R.A., 2021. Rapid Cycling Thermal Swing Adsorption Apparatus: Commissioning and Data Analyses for Water Adsorption of Zeolites 4A and 13X Over 2000 Cycles. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 60, no. 19, pp. 7487-7494. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/acs.iecr.1c00469.

JACOBS, J.H., DEERING, C.E., SUI, R., LESAGE, K.L. y MARRIOTT, R.A., 2022. Degradation of desiccants in temperature swing adsorption processes: the temperature dependent degradation of zeolites 4A, 13X and silica gels. ,

JEDLI, H., BOUZGARROU, S.M., HASSANI, R., SABI, E. y SLIMI, K., 2024. Adsorption of CO₂, CH₄ and H₂ onto zeolite 13 X: Kinetic and equilibrium studies. *Heliyon*, vol. 10, no. 23, pp. e40672. ISSN 24058440. DOI 10.1016/j.heliyon.2024.e40672.

KUMAR, R., HUGGAHALLI, M., DENG, S. y ANDRECOVICH, M., 2003a. Trace Impurity Removal from Air. En: Company: SpringerDistributor: SpringerInstitution: SpringerLabel: Springernumber: 3publisher: Kluwer Academic Publishers, *Adsorption*, vol. 9, no. 3, pp. 243-250. ISSN 1572-8757. DOI 10.1023/A:1024701917647.

KUMAR, R., HUGGAHALLI, M., DENG, S. y ANDRECOVICH, M., 2003b. Trace Impurity Removal from Air. En: Company: SpringerDistributor: SpringerInstitution: SpringerLabel: Springernumber: 3publisher: Kluwer Academic Publishers, *Adsorption*, vol. 9, no. 3, pp. 243-250. ISSN 1572-8757. DOI 10.1023/A:1024701917647.

L. MC CABE, W., C. SMITH, J. y HARRIOTT, P., 2007. *Operaciones unitarias en ingeniería química*. Séptima edición. S.I.: Mc Graw Hill. Ingeniería Química, ISBN 970-10-6174-8.

LAWATE, S. y DESHMUKH, B.B., 2015. Analysis of Heads of Pressure Vessel. , vol. 4, no. 2,

LEE, J.-S., KIM, J.-H., KIM, J.-T., SUH, J.-K., LEE, J.-M. y LEE, C.-H., 2002. Adsorption Equilibria of CO₂ on Zeolite 13X and Zeolite X/Activated Carbon Composite. *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 47, no. 5, pp. 1237-1242. ISSN 0021-9568. DOI 10.1021/je020050e.

LIAN, Y., DENG, S., LI, S., GUO, Z., ZHAO, L. y YUAN, X., 2019. Numerical analysis on CO₂ capture process of temperature swing adsorption (TSA): Optimization of reactor geometry. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 85, pp. 187-198. ISSN 17505836. DOI 10.1016/j.ijggc.2019.03.029.

LIU, C.-T., LINDSAY, W.T., y JR., 1970. Vapor Pressure of D₂O from 106 to 300 °C. *Journal of Chemical & Engineering Data* [en línea], Disponible en: <https://doi.org/10.1021/je60047a015>.

MERZ, B., KUIJPERS, L., SOLOMON, S., O. ANDERSON, S., DAVIDSON, O., PONS, J., DE JAEGER, D., KESTIN, T., MANNING, M. y MEYER, L., 2005. Special Report: Safeguarding the Ozone Layer and the Global Climate System. [en línea]. S.I.: IPCC/TEAP. Disponible en: <https://www.ipcc.ch/report/safeguarding-the-ozone-layer-and-the-global-climate-system/>.

NASA, 2025. Carbon Dioxide Concentration | NASA Global Climate Change. *Climate Change: Vital Signs of the Planet* [en línea]. [consulta: 7 abril 2025]. Disponible en: <https://climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide?intent=121>.

O. LEVENSPIEL, 1996. *Flujo de Fluidos e Intercambio de Calor*. S.I.: Reverté. ISBN 978-84-291-7968-2.

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. Fifth. S.I.: Mc Graw Hill. ISBN 0-07-239266-5.

QI, M., PARK, J., LEE, I. y MOON, I., 2022. Liquid air as an emerging energy vector towards carbon neutrality: A multi-scale systems perspective. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 159, pp. 112201. ISSN 1364-0321. DOI 10.1016/j.rser.2022.112201.

REGE, S.U., YANG, R.T. y BUZANOWSKI, M.A., 2000a. Sorbents for air prepurification in air separation. ,

REGE, S.U., YANG, R.T. y BUZANOWSKI, M.A., 2000b. Sorbents for air prepurification in air separation. ,

SINGLA, R. y CHOWDHURY, K., 2019. Comparisons of thermodynamic and economic performances of cryogenic air separation plants designed for external and internal compression of oxygen. *Applied Thermal Engineering*, vol. 160, pp. 114025. ISSN 13594311. DOI 10.1016/j.applthermaleng.2019.114025.

SMITH, R., 2016. *Chemical Process Design and Integration*. Segunda. S.I.: Wiley. ISBN 978-1-119-99013-0.

SODECA, [sin fecha]. *Ventiladores centrífugos y extractores en línea para conductos*. S.I.: s.n.

STULL, D.R., 1947. Vapor Pressure of Pure Substances. Organic and Inorganic Compunds. *Industrial & Engineering Chemistry* [en línea], Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie50448a022>.

The Engineering ToolBox. [en línea], [sin fecha]. [consulta: 19 junio 2025]. Disponible en: <https://www.engineeringtoolbox.com/>.

WANG, S., WANG, Y., KUANG, Y., XU, S., GAO, S., LIU, L., NIU, H., XIAO, P. y HUANG, B., 2022. Adsorption behaviour of molecular sieve and activated carbon for CO₂ adsorption at cold temperatures. *Carbon Neutrality*, vol. 1, no. 1, pp. 16. ISSN 2731-3948. DOI 10.1007/s43979-022-00017-5.

XIANGRUN. PRODUCTION OF SORBENTS AND CATALYST, [sin fecha]. Activated alumina pellets. *pseudo boehmite|activated alumina|alumina catalysts-Zibo Xiangrun* [en línea]. [consulta: 20 mayo 2025]. Disponible en: <https://xradSORBENT.com/product-detail/activated-alumina-pellets/>.

ZHANG, P. y WANG, L., 2013. Numerical Analysis on the Performance of the Three-Bed Temperature Swing Adsorption Process for Air Prepurification. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 52, no. 2, pp. 885-898. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/ie302166z.

ZHANG, P., WANG, Z. y WANG, L., 2024. Performance study on an energy-efficient TSA air-purification process utilizing compression heat regeneration. *Separation and Purification Technology*, vol. 349, pp. 127854. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2024.127854.

APÉNDICE I-A: LISTA DE SÍMBOLOS

I-A.1. SÍMBOLOS LATINOS

A	Área
b	Parámetro de la isoterma de Langmuir
c_{mg}/m^3	Concentración en miligramos por metro cúbico
c_p	Capacidad calorífica
c_{PPMv}	Concentración en partes por millón
c_0	Concentración inicial del contaminante en el gas
dc	Concentración de polvo
d_p	Diámetro de partícula
h	Coefficiente local de transmisión de calor
i	Componente i. Adsorbato sobre el que se realiza el cálculo
j	Componente j. El otro adsorbato que compite con i
K	Coefficiente de separación
L	Longitud del lecho
$\dot{m}$	Flujo másico
M_p	Concentración en peso de partículas
N	Número de etapas
n	Factor de corrección por condensación capilar
PM	Peso molecular
P_i	Presión parcial de un componente
P_{op}	Presión de operación
P^*	Presión de saturación
p	Presión
Q	Calor
q	Moles adsorbidos

q_m	Parámetro de adsorción máxima
R	Constante de los gases ideales
t	Tiempo
t^*	Tiempo de saturación
T_{op}	Temperatura de operación
V	Volumen total del gas
V_p	Volumen de partículas
U	Coefficiente global de transmisión de calor
u	Velocidad superficial del gas a través del lecho
u_s	Velocidad del gas a través del separador de fases
u_∞	Velocidad de filtración
$v_{T_{op}, P_{op}}$	Flujo volumétrico de aire
W	Trabajo
W_{sat}	Carga de adsorbato en el sólido en equilibrio
W_0	Carga de adsorbato en el sólido al principio del ciclo
Y	Humedad absoluta molar
Y'	Humedad absoluta másica
y	Fracción molar

I-A.2. SÍMBOLOS GRIEGOS

α	Relación de compresiones
γ	Factor de expansión
Δp	Caída de presión
Δp_b	Caída de presión en el filtro
ΔT	Diferencia de temperaturas
ΔT_{ml}	Diferencia de temperaturas media logarítmica

ε	Porosidad de la torta filtrante
ε_b	Porosidad del lecho
ε_g	Porosidad del gas
η	Viscosidad del gas
ρ	Densidad del aire
ρ_b	Densidad del lecho
ρ_L	Densidad del líquido
ρ_p	Densidad de las partículas sólidas
ϕ	Humedad relativa

I-A.3. ABREVIATURAS

MTZ	Zona de transferencia de masa
SI	Sistema Internacional
TSA	Temperature Swing Adsorption
PSA	Pressure Swing Adsorption

I-A.4. NOMENCLATURA PROPIA DEL CÓDIGO ASME

c_c	Margen de grosor por corrosión
D_a	Diámetro del eje mayor del cabezal elipsoidal antes de la adición del margen por corrosión
E_j	Eficacia de junta
n	Parámetro de corrección dependiente del diámetro
P	Presión manométrica de operación
r_i	Radio interno de la carcasa antes de la adición del margen por corrosión
S	Presión máxima de trabajo
t	Grosor de la pared
W	Peso
ρ_m	Densidad del material

APÉNDICE I-B: TABLAS Y GRÁFICAS

I-B.1 EVALUACIÓN ECONÓMICA

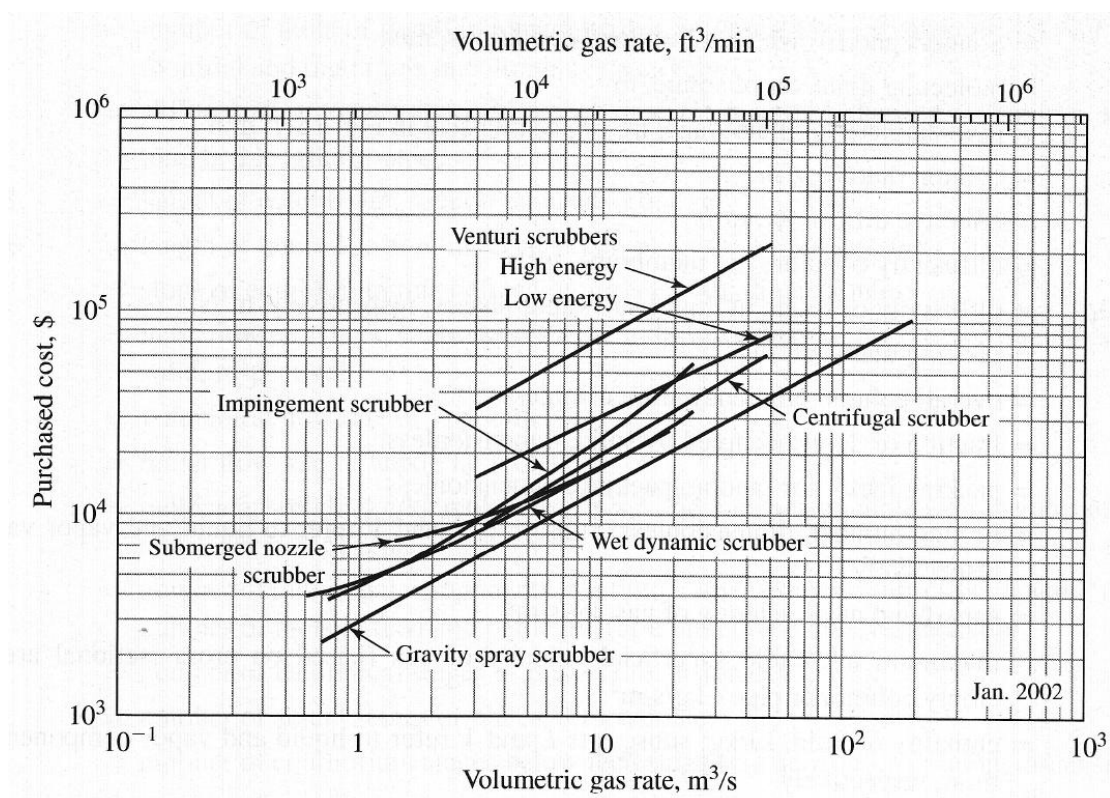


Fig. I-B.1. Coste de compra de lavadores para polvo. (Peters, Timmerhaus y West 2003)

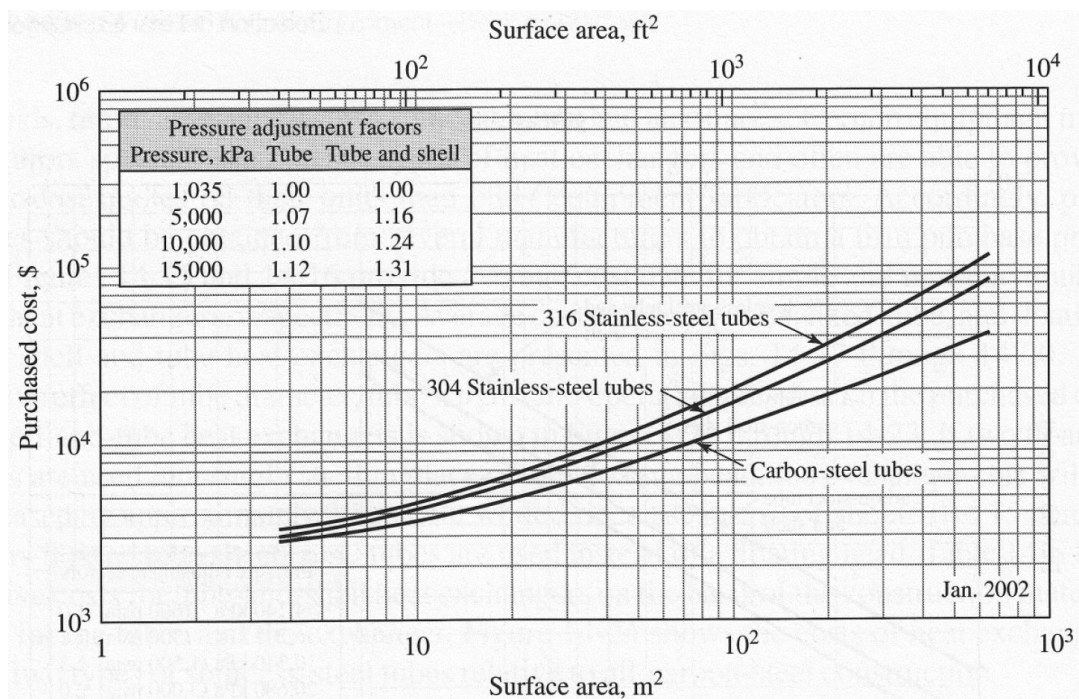


Fig. I-B.2. Coste de compra de intercambiadores de calor de carcasa y tubo, con tubos fijos. Pinch cuadrado de 0.019 m OD x 0.025 m y carcasa de acero al carbono que opera a 1035 kPa de 4.88 o 6.10 m. (Peters, Timmerhaus y West 2003)

I-B.3. OTRAS TABLAS Y GRÁFICAS

Tabla I-B.I. Características del clima de Gijón. (Atlas)

	Humedad (%)	Temperatura(°C)	Presión (mbar)
Enero	78	11.8	1020.6
Febrero	77	11.9	1018.9
Marzo	77	13.6	1017.6
Abril	79	15.3	1015.7
Mayo	81	17	1017.7
Junio	83	19.3	1017.8
Julio	82	21.4	1018.5
Agosto	80	22.6	1018.3
Septiembre	78	21.7	1018.5
Octubre	74	19.5	1016.7
Noviembre	77	14.9	1015.8
Diciembre	75	13.2	1021.5
MEDIA	78.42%	16.9	1018.1

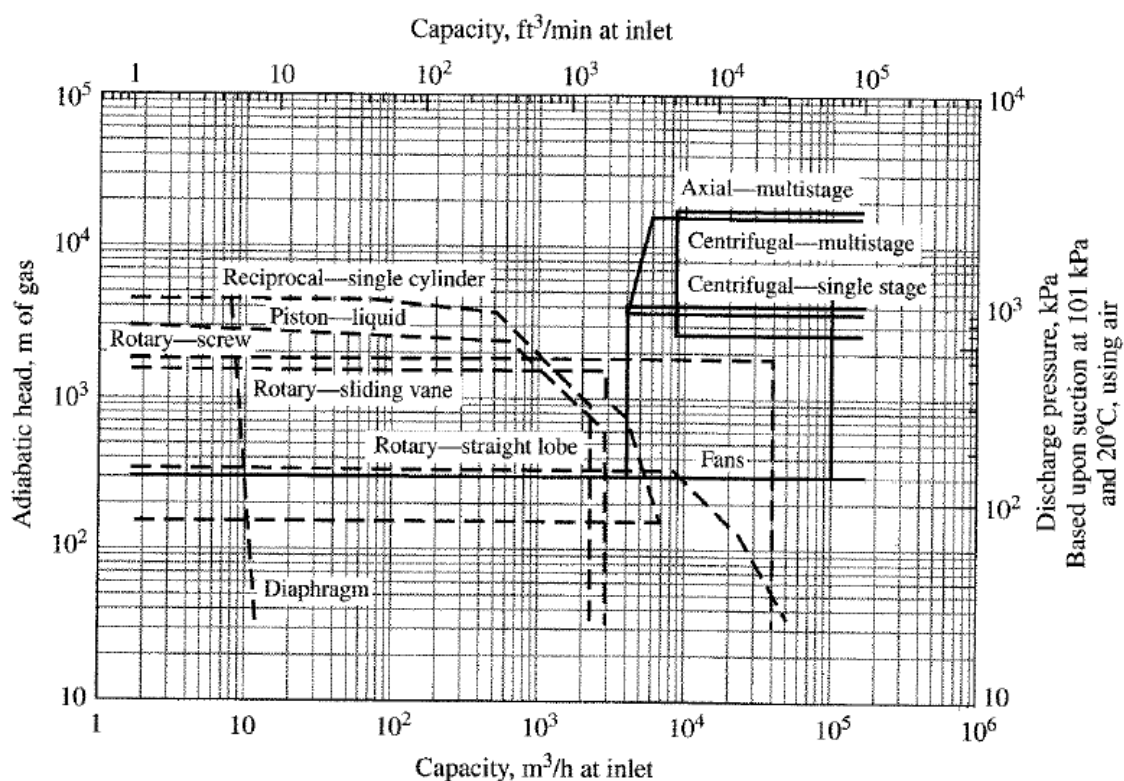


Fig. I-B.3. Selección de compresores basado en el rango típico de operación de los tipos de compresores disponibles industrialmente. Para las líneas sólidas usar el eje izquierdo (cabeza); para las líneas discontinuas, usar el eje derecho (presión).

Tabla I-B.II. Cálculos para la optimización del tiempo de ciclo de adsorción

Tiempo de operación (h)	agua/ciclo (kg)	CO/ciclo (kg)	Ciclos anuales	Duración (años)	Precio adsorbente (€/año)	Pérdida de carga (Pa)	Altura equipo (m)	Coste anual adsorbentes (€/año)
4	176.0	57.9	990	1	13 155.5	547.10	0.61	13155.5
6	263.9	86.9	660	2	9 866.7	820.64	0.92	9866.7
8	351.9	115.9	495	3	8 770.4	1 094.19	1.22	8770.4
10	439.9	144.8	396	4	8 222.2	1 367.74	1.53	8222.2
12	527.9	173.8	330	5	7 893.3	1 641.29	1.84	7893.3
14	615.8	202.8	283	6	7 674.1	1 914.84	2.14	7674.1
16	703.8	231.7	248	7	7 517.4	2 188.38	2.45	7517.4
18	791.8	260.7	220	8	7 400.0	2 461.93	2.75	7400.0
20	879.8	289.7	198	9	7 308.6	2 735.48	3.06	7308.6
22	967.7	318.6	180	10	7 235.5	3 009.03	3.37	7235.5
24	1 055.7	347.6	165	11	7 175.7	3 282.58	3.67	7175.7
30	1 319.6	434.5	132	14	7 047.6	4 103.22	4.59	7047.6
35	1 539.6	506.9	113	16	7 194.4	4 787.09	5.36	7194.4
40	1 759.5	579.4	99	19	6 924.0	5 470.96	6.12	6924.0
48	2 111.4	695.2	83	23	6 863.8	6 565.15	7.34	6863.8

Tabla I-B.III. Tabla completa para el cálculo del área de los cambiadores C-I.1, C-I.3 y C-I.4

	Aire					Refrigerante (amoníaco)					Cambiador			
	$\dot{m}$ (kg/s)	T_e (°C)	T_s (°C)	c_p (kJ/kg K)	h (W/m² °C)	$\dot{m}$ (kg/s)	T_e (°C)	T_s (°C)	c_p (kJ/kg K)	h (W/m² °C)	U (W/m² °C)	ΔT_{ml} (°C)	Q (kW)	A (m²)
C-I.1	5.2	195	15	1.032	100	12.8	-32	20	3.05	1 000	96.2	71.5	975.3	150.08
C-I.3	5.2	109	15	1.032	100	6.7	-32	20	3.05	1 000	90.9	46.4	512.1	121.40
C-I.4	5.2	109	15	1.032	100	6.7	-32	20	3.05	1 000	90.9	46.4	512.1	121.40

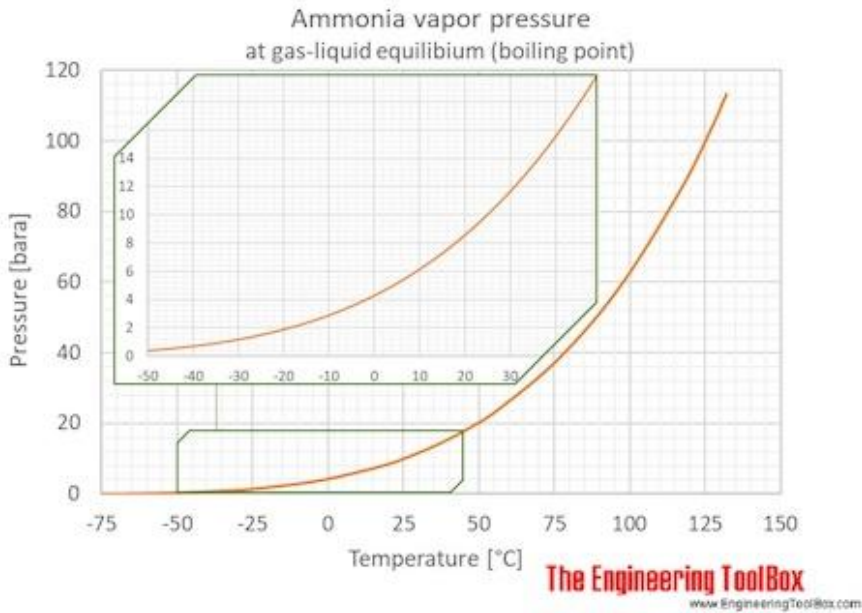


Fig. I-B.4. Presión de vapor del amoniaco en función de la temperatura («The Engineering ToolBox»)

APÉNDICE I-C: OTROS CÁLCULOS

I-C.1. ECUACIONES PARA EL CÁLCULO DE LOS PARÁMETROS DE LA ISOTERMA DE LANGMUIR EXTENDIDA Y MODIFICADA

Para el cálculo de los parámetros q_m , b y n se aplicarán las ecuaciones I-C.1, I-C.2, I-C.3 en los siguientes casos:

- Zeolita 13X + agua
- Alúmina activada + agua
- Alúmina activada + CO₂

Para el caso de la zeolita 13X + CO₂ se aplicarán las ecuaciones I-C.4 y I-C.5. En este caso el valor de n_i es de cero.

$$q_m(T) = Q_0 \exp\left(\frac{Q_1}{T}\right) \quad [\text{I-C.1}]$$

$$b(T) = B_0 \exp\left(\frac{B_1}{T}\right) \quad [\text{I-C.2}]$$

$$n(T) = N_0 \exp\left(\frac{N_1}{T}\right) \quad [\text{I-C.3}]$$

$$q_m(T) = 30.6 \exp\left(-\frac{T}{197.2}\right) \quad [\text{I-C.4}]$$

$$b(T) = -2 \cdot 10^{-5} T^2 + 0.0134 T - 1.9315 \quad [\text{I-C.5}]$$

Las constantes de las ecuaciones I-C.1, I-C.2, I-C.3 han sido extraídas de un estudio realizado por Zhang y Wang (Zhang y Wang 2013), y se presentan en la Tabla I-C.I. Las ecuaciones I-C.4 y I-C.5 proceden de realizar regresiones sobre los datos extraídos de artículos de los grupos Lee y Jedli respectivamente (Lee et al. 2002; Jedli et al. 2024). La Tabla I-C.II muestra los datos extraídos y la Figura I-C.1 muestra las regresiones realizadas. Cabe mencionar que la Ecuación I-C.4 fue ligeramente modificada para despejarla en función de la temperatura.

Tabla I-C.I. Constantes empleadas en el cálculo de los parámetros de la isoterma de Langmuir extendida y modificada. (Lian et al. 2019)

	Q_0 (mol/kg)	Q_1 (K)	B_0 (Pa ⁻¹)	B_1 (K)	N_0	N_1 (K)
Zeolita 13X + agua	2.296	433.92	$4.19 \cdot 10^{-9}$	5189.3	47784.2	-3446
Alúmina activada + agua	0.0934	1030.8	$7.50 \cdot 10^{-3}$	490.85	40548.1	-2987
Alúmina activada + CO ₂	$1.31 \cdot 10^{-4}$	2604.5	$5.76 \cdot 10^{-5}$	191.57	0	0

Tabla I-C.II. Datos de equilibrio para la adsorción de CO₂ por parte de la Zeolita 13X.

Parámetro q_m		Parámetro b	
T (K)	q_m (mol/kg)	T (K)	b (1/Pa)
273.15	7.55	5.332	0.050925
293.15	6.82	5.142	0.04815
313.15	6.13	4.962	0.045075
333.15	5.60		
353.15	5.02		

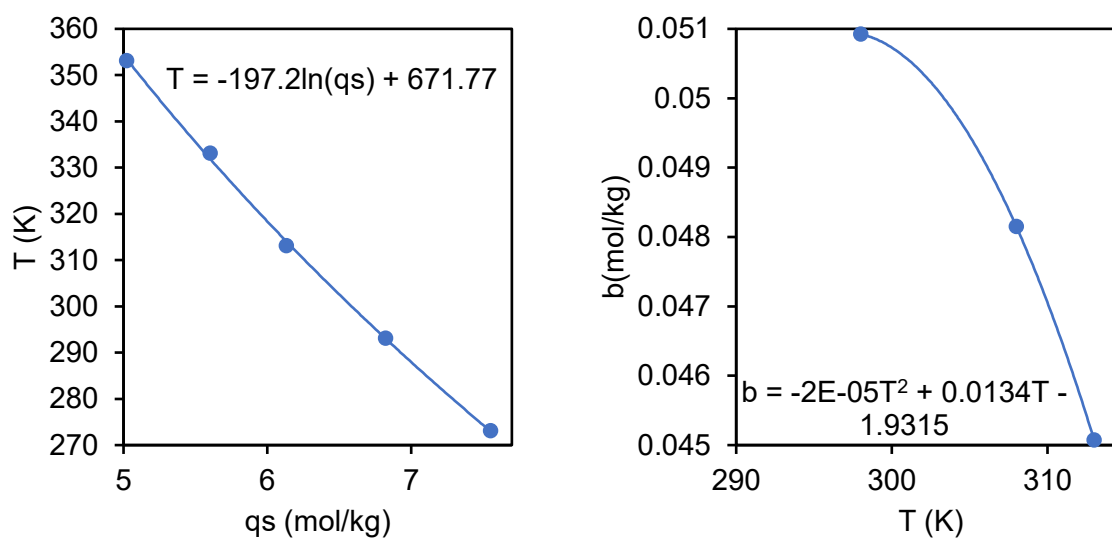


Fig. I-C.1. Líneas de ajuste para la determinación de expresiones matemáticas que permitan calcular los distintos parámetros de las ecuaciones de la isoterma de Langmuir modificada y extendida en función de la temperatura.



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

SECCIÓN II: DESTILACIÓN CRIOGÉNICA

por

Sergio Alfaro Blanco

Oviedo, julio de 2025

ÍNDICE

II.1. INTRODUCCIÓN	124
II.1.1. Marco teórico	125
II.1.1.1. Licuefacción del aire	125
II.1.1.2. Destilación	127
II.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	129
II.3. DISEÑO DE LA SECCIÓN	133
II.3.1. Descripción de la sección	134
II.3.1.1. Columna HP	134
II.3.1.2. Columna LP	134
II.3.1.3. Hervidor-Condensador (EX-II.1)	135
II.3.2. Estrategia de diseño y resultados	137
II.3.2.1. Columna LP	137
II.3.2.2. Columna HP	140
II.3.2.3. RE-II.1	147
II.3.2.3. EX-II.1	148
II.4. DISEÑO MECÁNICO	149
II.4.1. Diseño mecánico de la columna HP	150
II.5. DIAGRAMA DE TUBERÍAS	153
II.5.1. Tramo 1	154
II.5.2. Tramo 2	157
II.5.3. Tramo 3	158
II.6. EVALUACIÓN ECONÓMICA	159
II.6.1. Columnas	160
II.6.2. Válvulas	160
II.6.3. Intercambiadores de calor	161
II.7. BIBLIOGRAFÍA	162
APÉNDICE II-A: LISTA DE SÍMBOLOS	164

II-A.1. Símbolos latinos	165
II-A.2. Símbolos griegos	165
II-A.3. Nomenclatura propia del ASME	165
APÉNDICE II-B: TABLAS Y FIGURAS	166
II-B.1. Tablas	167
II-B.2. Figuras	169
APÉNDICE II-C: OTROS CÁLCULOS	173
II-C.1. Cálculo del área de C-II.1	174
II-C.2. Cálculo de las necesidades anuales de refrigerante	174

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla II.I	Balances de materia de la sección II. Corrientes 9 a 14	132
Tabla II.II	Balances de materia de la sección II. Corrientes 15 a 21	132
Tabla II.III	Concentraciones de oxígeno a la salida en función del número de platos. Para cada caso, se muestra también cual sería el plato óptimo de alimentación.	138
Tabla II.IV	Flujos molares de las corrientes, obtenidos como resultado de la simulación de la LP por Aspen HYSYS	139
Tabla II.V	Resultado del análisis de Mach en la primera sección de tubería	155
Tabla II.VI	Resultados del análisis de flujo en el tramo 1	156
Tabla II.VII	Resultados del análisis de flujo en el tramo 2	157
Tabla II.VIII	Resultados del análisis de flujo en el tramo 3	158
Tabla II.IX	Resultados del cálculo de los costes de las columnas HP y LP	160
Tabla II.X	Resultados del cálculo de los costes de todas las válvulas utilizadas	161
Tabla II.XI	Costes de los intercambiadores de calor	161
Tabla II-B.I	Resultados del cálculo manual de los platos en la columna HP	167
Tabla II-B.II	Resultados de la optimización del número de platos y el plato de alimentación para la obtención de concentración de oxígeno medida en ppm mínima en la corriente 16	168
Tabla II-B.III	Datos de equilibrio de la mezcla N ₂ -O ₂ obtenidos por simulación con Aspen HYSYS	169

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura II.1.	Diagrama T-S Hausen del aire	126
Figura II.2.	Esquema de referencia de ciclos de expansión isoentálpica (izquierda) e isentrópica (derecha) del aire	127
Figura II.3.	Diagrama de flujo de la sección II	130
Figura II.4.	Plano de vista seccionada del módulo EX-II.1	136
Figura II.5.	Diagrama de flujo para la simulación de la columna LP en Aspen HYSYS	137
Figura II.6.	Gráfica comparativa entre el número de platos y la concentración en ppm mínima de oxígeno en cada caso	138
Figura II.7.	Entalpías de líquido saturado y vapor saturado para mezclas N_2-O_2 en todo el rango de composiciones, a 5 atm	140
Figura II.8.	Diagrama T-xy de la mezcla N_2-O_2	141
Figura II.9.	Diagrama x-y de la mezcla N_2-O_2	141
Figura II.10.	Diagrama de Hausen con recorrido de operaciones trazado	142
Figura II.11.	Diagrama y-x con las rectas de operación y los platos teóricos trazados, empleando el método McCabe-Thiele	145
Figura II.12.	Diagrama de inundación de Fair	146
Figura II-B.1.	Coste de torres y columnas según el material utilizado y su peso, en enero del 2002. Los costes son para cuerpo con dos cabezales y soporte, pero sin platos, empaque, o conexiones.	169
Figura II-B.2.	Coste de distintos platos, según su tipo, el material utilizado y el diámetro de columna, en enero del 2002.	170
Figura II-B.3.	Coste de válvulas bridadas según el tipo de válvula, el material utilizado y el diámetro nominal, en enero del 2002.	170
Figura II-B.4.	Coste de intercambiadores de calor de múltiples tubos según el material utilizado y el área de intercambio de calor, en enero de 2002.	171
Figura II-B.5.	Coste por unidad de longitud de tuberías atornilladas y soldadas según el material utilizado, el catálogo de tubería y su diámetro nominal, en enero del 2002	171
Figura II-B.6.	Coste de intercambiadores de placas soldados y con juntas	172

II.1. INTRODUCCIÓN

La producción del amoníaco verde implica un origen poco contaminante de las materias primas que actúan como reactivos en su síntesis, es decir, el nitrógeno y el hidrógeno. Esta sección del proyecto se enfoca en la obtención de nitrógeno mediante un proceso "verde", en este caso, mediante destilación criogénica de una corriente de aire, previamente tratada para la eliminación de contaminantes u otras sustancias que puedan alterar el funcionamiento del sistema de separación.

En primer lugar, la corriente de aire ya tratada se someterá a una licuefacción parcial, de forma que se obtendrá una mezcla líquido-vapor que, a continuación, se introducirá como alimentación al sistema de destilación criogénica, consistente en una doble columna de fraccionamiento Linde. Con estos procesos se busca obtener una corriente de nitrógeno extremadamente puro que será una de las corrientes de entrada a la sección IV. Como subproducto se obtiene una corriente de oxígeno de alta pureza, que dado su alto coste, se comercializará por los canales oportunos.

II.1.1. MARCO TEÓRICO

A continuación, se llevará a cabo una descripción simple del marco teórico que corresponde a las diferentes etapas de esta parte del proceso.

II.1.1.1. Licuefacción del aire

Como describe Ángel Vian Ortuño en el libro Introducción a la Química Industrial (2012), para llevar a cabo una destilación del aire, se debe previamente realizar una licuefacción parcial del mismo, para ello se necesita un ciclo de compresión-expansión con un intercambio de calor intermedio. Esta operación se puede modelizar utilizando un diagrama entropía-temperatura o diagrama Hausen, que se puede apreciar en la Figura II.1.

En este diagrama se observa la curva característica, con forma de campana, en cuyo punto más alto se encuentra el punto crítico, y que separa la zona de dos fases de las zonas de una única fase. Esta curva se divide en dos ramas, la rama izquierda representa el estado líquido saturado, mientras que la rama derecha representa el vapor saturado. Cualquier punto que se encuentre dentro de la campana implica la coexistencia de fase líquida y vapor. A su vez se pueden apreciar tanto las líneas isobaras, en el rango de 1 a 200 atmósferas, que son

generalmente curvas en la zona de una única fase, pero se vuelven rectas al entrar dentro de la campana, como las líneas isoentálpicas, que varían de 20 a 120 kcal/kg. (Ortuño, 2012)

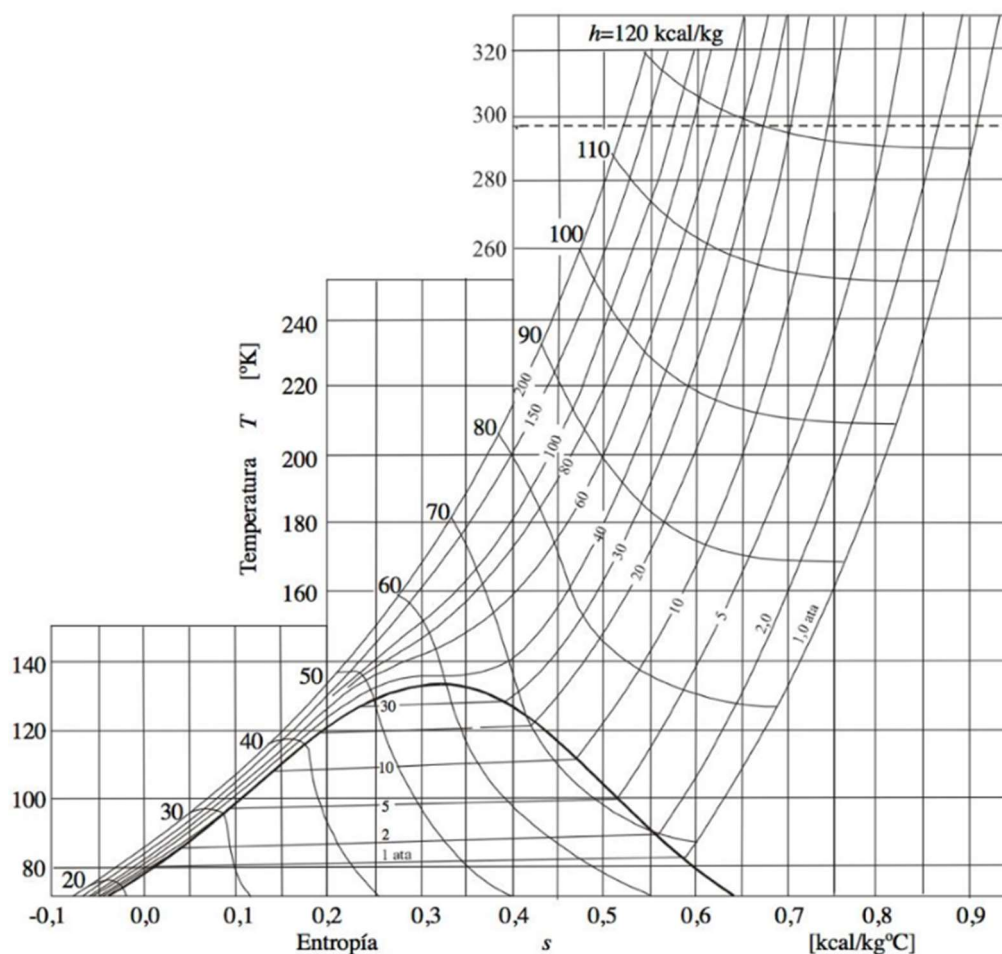


Fig.II.1. Diagrama T-S Hausen del aire (Ortuño, 2012)

Dependiendo del tipo de expansión que se lleva a cabo se pueden distinguir dos formas de realizar el proceso:

1. Expansión isoentálpica: Tiene lugar cuando se deja expandir el gas a través de una estrangulación (una llave poco abierta, por ejemplo) sin producir trabajo externo. En este caso el enfriamiento se logra a costa de la energía interna de las moléculas gaseosas. Este efecto recibe en termodinámica el nombre de Joule-Thomson. En el diagrama de Hausen esta expansión seguiría la isolínea de entalpía hasta descender a la presión deseada. (Ortuño, 2012)
2. Expansión isentrópica: Ocurre cuando se deja expandir el gas ya comprimido dentro de una turbina de expansión de forma que se produce trabajo externo. El enfriamiento generado es mucho mayor que el obtenido por expansión isoentálpica y el trabajo

generado en el sistema de expansión se puede utilizar para compensar el trabajo previo de compresión, reduciendo los gastos en energía. Si bien en el caso ideal, esta expansión se representaría con una recta vertical en el diagrama de Hausen, en la realidad se genera una ligera curvatura debido al índice politrópico del aire, siendo así una operación pseudoisentrópica. (Ortuño, 2012)

Se puede observar un esquema representativo de ambas modalidades en la Figura II.2.

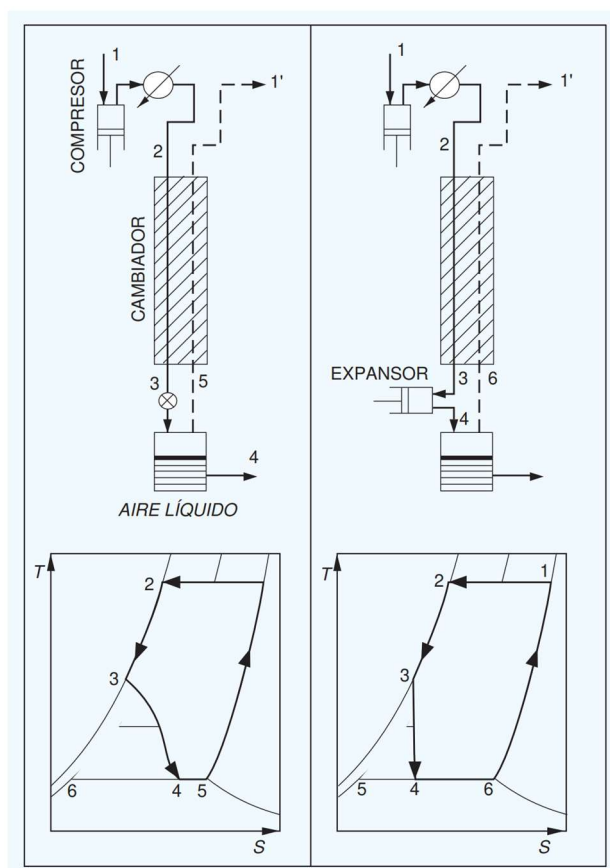


Fig.II.2 Esquema de referencia de ciclos de expansión isoentálpica (izquierda) e isentrópica (derecha) del aire (Ortuño, 2012)

II.1.1.2. Destilación

Una destilación es una operación unitaria que consiste en la separación de dos o más compuestos por la diferencia de sus volatilidades y se basa en consecutivos cambios de fase y equilibrios que implican tanto transferencia de calor como de materia. Esta operación se lleva a cabo en una columna que puede ser de platos o de relleno y se puede operar tomando todo el condensado como producto o, de forma habitual, retornando parte del mismo a la columna como reflujo, recibiendo entonces la operación el nombre de rectificación.

La rectificación que se lleva a cabo en este proyecto consiste en una destilación criogénica, la cual se diferencia en varios aspectos de una rectificación convencional, y que hay que tener en cuenta a la hora del diseño de la misma.

1. Las temperaturas de operación son mucho más bajas que en la rectificación convencional, lo que requiere de una correcta elección del material de construcción y un diseño mecánico adecuado.
2. En las rectificaciones convencionales, lo que se quiere separar suele ser una mezcla líquida, sin embargo, en la rectificación criogénica se alimenta una mezcla que en condiciones atmosféricas normales se encontraría en fase gas.
3. Haciendo referencia al punto anterior, las condiciones de operación y la naturaleza de los compuestos hacen que sea extremadamente fácil que ocurran fenómenos de cavitación en caso del uso de equipos de impulsión (sobre todo en el caso del reflujo), por lo que se deberá prescindir de los mismos tanto como sea posible.
4. Las temperaturas extremadamente bajas de operación hacen que el uso de servicios auxiliares de refrigeración en el propio sistema de rectificación sea imposible de sostener económicamente en aplicaciones a escala industrial, por lo que para la refrigeración se deberán utilizar corrientes pertenecientes al proceso o, en caso de que no existieran o no fueran suficientes, generarlas mediante ciclos de compresión-expansión para la generación de frío a costa de un mayor gasto en energía eléctrica (costes de operación) y en equipos adicionales (costes fijos).
5. Debido a los problemas comentados en el apartado anterior, se han ideado métodos de ahorro energético para los sistemas de destilación criogénica. Entre estos se pueden destacar la implementación de intercambiadores de calor de placas y aletas con flujo inverso, que permiten hasta cierto punto abaratar los costes en equipos de tratamiento previo eliminando contaminantes condensables. (Timmerhaus y Flynn, 1989)

II.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

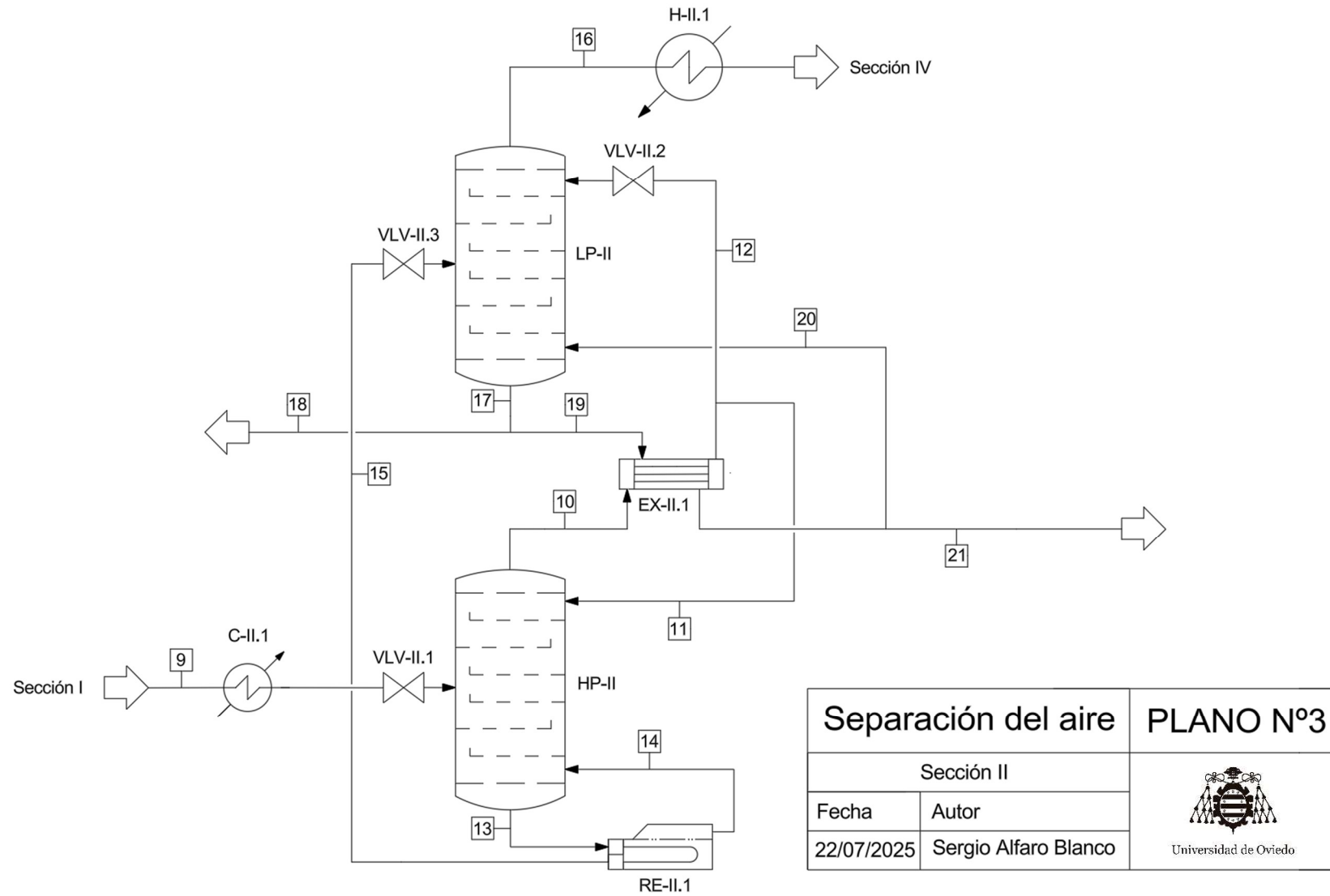


Fig.II.3. Diagrama de flujo de la sección II

A continuación, se procederá a explicar las partes del diagrama de flujo representado en la Figura II.3:

- En primer lugar, la corriente 9 llega desde la sección I y pasa por un conjunto de intercambiadores de calor representado en el diagrama como C-II.1, dentro del cual también se incluye el hervidor de la columna de alta presión (RE-II.1). Esta corriente que pasará a recibir el nombre de 9.1 se hace pasar por la válvula VLV-II.1 para su expansión, recibiendo el nombre 9.2, y se introduce como alimentación a la columna HP.
- De la columna HP salen dos corrientes, la 10 por cabezas y la 13 por colas. La corriente 10 entra al intercambiador EX-II.1, que se encuentra acoplado físicamente con ambas columnas HP y LP. Dicha corriente tras salir del intercambiador se escinde en las corrientes 12 y 11, que hacen referencia al destilado y al reflujo de la columna HP respectivamente. La corriente 13 se hace pasar por RE-II.1 y tras su vaporización parcial, se tendrán otras dos corrientes, 15 y 14, que son, a su vez, el residuo y la fracción de vapor recirculado de la columna HP.
- Ambas corrientes 12 y 15 se hacen pasar por las válvulas VLV-II.2 y VLV-II.3 para expandirse, obteniendo las corrientes 12.1 y 15.1. Ambas entran como alimentación en la columna de baja presión (LP), pero mientras la corriente 15.1 es alimentada en un plato intermedio la corriente 12.1 se alimenta directamente en el primer plato, de forma que se separará en ese primer plato en una fracción líquida (que actúa a modo de reflujo de la columna LP) y una fracción vapor (que se mezcla con el resto de vapor ascendente, saliendo por cabezas como la corriente 16).
- Por lo tanto, de la columna LP se obtendrán dos corrientes: la 16 por cabezas, extremadamente pura en nitrógeno y la 17, por colas, con una pureza de oxígeno elevada. La corriente 16 se hará pasar por un sistema de calentamiento representado por H-II.1 para alcanzar las condiciones de temperatura necesarias para la mezcla y posterior compresión, pasando a denominarse 16.1 y sus condiciones serán estudiadas en la sección IV.
- Para evitar la acumulación de posibles contaminantes condensables, se llevará a cabo una purga LOX en el sumidero de la LP (Kumar *et al.*, 2003), obteniéndose por tanto las corrientes 18 (purga) y 19.
- La corriente 19 se hace pasar por el intercambiador EX-II.1, donde se pone en contacto con la corriente 10, lo que permite su evaporación completa. A continuación, dicha corriente se escinde en otras dos, 20 y 21, las cuales representan la recirculación de vapor y la corriente de colas de la columna LP

Tabla II.I. Balances de materia de la sección II. Corrientes 9 a 14.

Corrientes	9	9.1	9.2	10	10.1	11	12	12.1	13	14
Flujo másico (kg/h)										
Nitrógeno	12 844	12 844	12 844	16 575	16 575	9 125	7 450	7 450	9 292	3 898
Oxígeno	3 937	3 937	3 937	2	2	1	1	1	5 035	1 099
Argon	218	218	218	10	10	5	4	4	293	79
TOTAL	16 999	16 999	16 999	16 587	16 587	9 131	7 455	7 455	14 620	5 076
T (°C)	15	-136.0	-174.0	-178.9	-178.9	-178.9	-178.9	-192.7	-174.9	-174.9
H (kJ/kg)	15.1	-223.8	-223.8	-217.8	-391.3	-391.3	-391.3	-391.3	-381.2	-195.5
P (kPa)	4 053.6	4 024.8	506.6	506.6	506.6	506.6	506.6	144.3	506.6	506.6

Tabla II.II. Balances de materia de la sección II. Corrientes 15 a 21.

Corrientes	15	15.1	16	17	18	19	19.1	20	21
Flujo másico (kg/h)									
Nitrógeno	5 394	5 394	12 844	2	$8 \cdot 10^{-3}$	2	2	1	0
Oxígeno	3 936	3 936	0	13 085	65	13 019	13 019	9 148	3 871
Argon	214	214	5	949	5	944	944	736	209
TOTAL	9 544	9 544	12 849	14 036	70	13 965	13 965	9 885	4 080
T (°C)	-174.9	-187.4	-194.2	-181.6	-181.6	-181.6	-181.6	-181.6	-181.6
H (kJ/kg)	-381.0	-381.0	-226.1	-385.5	-385.5	-385.5	-179.4	-179.4	-179.4
P (kPa)	506.6	171.1	121.6	121.6	121.6	121.6	121.6	121.6	121.6

II.3. DISEÑO DE LA SECCIÓN

II.3.1. DESCRIPCIÓN DE LA SECCIÓN

II.3.1.1. Columna HP

La columna de alta presión trabajará a una presión de 5 atm para asegurar una eficiencia térmica lo suficiente alta en la columna y permitiendo el acoplamiento energético entre la columna de baja presión y la de alta presión. Se diseñará como una columna de platos, en la que se utilizarán platos perforados debido a su menor coste de fabricación y por su mejor funcionamiento frente a compuestos corrosivos (Kister y Gill, 1992).

Se trabajará considerando una eficacia global de platos aproximada del 60% que es un valor razonable entre los valores comúnmente obtenidos en estudios experimentales para este tipo de plato en condiciones normales (55-65%) (Chen y Chuang, 1993). A su vez se considerará una velocidad superficial del gas equivalente al 70% de la velocidad de inundación como margen de seguridad y un valor intermedio de espaciado entre platos de 25 pulgadas o 0.6350 m, en base a las 20-30 pulgadas recomendadas en las reglas heurísticas (Walas, 1990). Otro factor importante a la hora de calcular el diámetro de la columna será el porcentaje de área total ocupado por el vertedero en cada plato, tomándose un valor del 8.8% (Treybal, 1988).

El hervidor (RE-II.1) consistirá en un cambiador de calor, en el cual el líquido que sale del último plato de la columna (13) intercambiará calor con la corriente de alimentación antes de la expansión (9), que circulará por el interior de un serpentín simple. Por otro lado, el condensador como se ha descrito en el epígrafe II.2., se encontrará acoplado al hervidor de la columna LP, llevándose a cabo la condensación total del vapor de nitrógeno ascendente.

II.3.1.2. Columna LP

La columna LP operará a una presión de 1.2 atm, con el objetivo de evitar la posible entrada de aire, en caso de una fuga en el sistema; por otro lado, al reducir la presión también se distancian más los puntos de ebullición de los componentes, lo que permite una mejor separación a la alta pureza a la que entra el nitrógeno. De la misma forma que en el caso de la HP, la diferencia de presiones entre ambas permite un intercambio de energía eficiente en el hervidor-condensador (EX-II.1).

La columna de baja presión, al igual que la de alta presión, es una columna de platos, pero en este caso se utilizarán platos de válvula ya que, aunque son ligeramente más costosos que los platos perforados, tienen una eficiencia mayor en operaciones a baja presión. Una ventaja de usar platos de válvulas, con respecto a los platos perforados, es que las válvulas

se pueden abrir y cerrar, ajustándose a los caudales de líquido y gas que circulan por la torre, lo que evita fenómenos indeseados, como la inundación o el goteo, que puede terminar en descarga de la torre (Kister y Gill, 1992). A diferencia del caso anterior, se considerará una eficacia de plato del 70% por el uso de platos de válvula y se mantendrá una separación entre platos de 0.6350 m.

La columna LP no dispondrá de un condensador, puesto que como está descrito en el epígrafe II.2.1, el reflujo de esta columna es proporcionado por la fracción líquida condensada tras la expansión de la corriente 12 que se introducirá por la parte superior (primer plato contando desde el condensador) de la columna LP. El hervidor se encuentra acoplado al condensador de la HP y, puesto que para cumplir el balance energético se necesita evaporar todo el líquido descendente de la columna, se necesitará realizar la purga LOX necesaria (18) antes de llegar al hervidor para lo que se utilizará una válvula de purga que desviará el 0,5% de la corriente 17 como dicha purga.

II.3.1.3. Hervidor–Condensador (EX-II.1)

Como bien describe Chakravarthy (2005), los mayores desarrollos en los diseños de hervidor-condensador utilizados industrialmente en la doble columna de fraccionamiento corresponden a los intercambiadores de placas y aletas de aluminio brazado y al modelo de intercambiador de carcasa y tubo de alto flujo. Siguiendo dicha recomendación, se modelará el EX-II.1 basado en la patente US9488408B2 (Shelat *et al.*, 2016), en la que se optará el arreglo correspondiente a un intercambiador de calor de flujo descendente multitubular. El plano representativo de dicho intercambiador se puede observar en la Figura II.4.

El arreglo dispone principalmente de un intercambiador de calor de carcasa y tubo (identificado como 30B en la Figura II.4) y unas placas tubulares opuestas (36 y 38) conectadas mediante una carcasa cilíndrica (40). También se dispone de una unión de expansión en forma de fuelle (42) en caso de la necesidad de realizar una expansión diferencial. A su vez, entre estas dos placas tubulares se encuentran una multitud de tubos (55) en disposición vertical a través de los cuales se produce el intercambio de calor indirecto entre la corriente de oxígeno descendente en el interior de los tubos y la corriente de nitrógeno ascendente en el lado de la carcasa.

La placa (38) posee una entrada de vapor rico en nitrógeno (44) por una conducción central (46) que, gracias a una placa de choque (66) situada en la parte inferior del módulo y apoyada mediante un grupo de soportes (68), una vez en el interior de la carcasa se difunde de forma radial tal y como se observa en las flechas de flujo 60. En la carcasa existen también dos conducciones (48A y 48B) para la salida del condensado (20) formando dos corrientes

(20A y 20B), las cuales se pueden distribuir para el reflujo de la HP y el reflujo de la LP respectivamente.

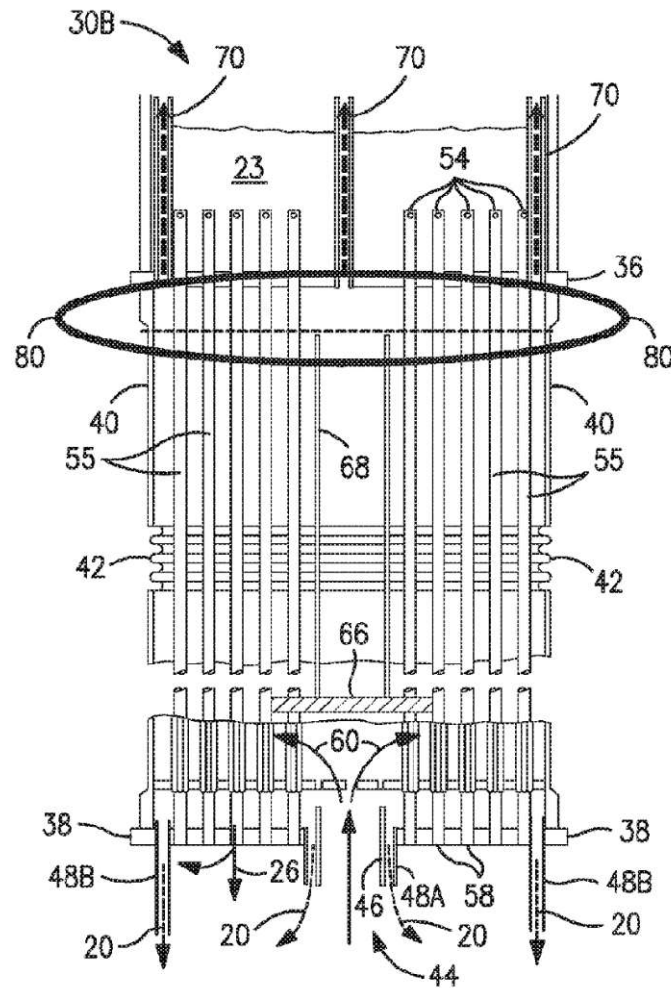


Fig.II.4. Plano de vista seccionada del módulo EX-II.1 (Shelat *et al.*, 2016)

En el plano se muestran las corrientes de alimentación de oxígeno puro como 54, en la parte superior del módulo, en uno de los extremos de los tubos 55 de la placa tubular 36, mientras que la salida se encuentra en el extremo opuesto de los tubos 55, marcada con el número 58 y perteneciendo a la placa tubular 38. Todos los tubos (55) del arreglo deben tener el mismo diámetro, su superficie externa debe ser estriada y la parte interna debe estar diseñada para mejorar la superficie de evaporación.

Finalmente, existen conducciones en la parte superior del módulo marcadas con el número 70 que permiten la purga de vapores no condensantes de forma continua o de forma controlada mediante válvulas de control (no mostradas en el plano). (Shelat *et al.*, 2016)

II.3.2. ESTRATEGIA DE DISEÑO Y RESULTADOS

II.3.2.1. Columna LP

Para la columna de baja presión se realizará una simulación en Aspen HYSYS mediante el modelo termodinámico Peng-Robinson. Dicha columna carece de condensador, pero Aspen HYSYS no permite introducir una columna de destilación sin condensador, por lo que se recurrirá a modelarla como un *reboiled absorber*. El diagrama de flujo utilizado en la simulación se puede observar en la Figura II.5.

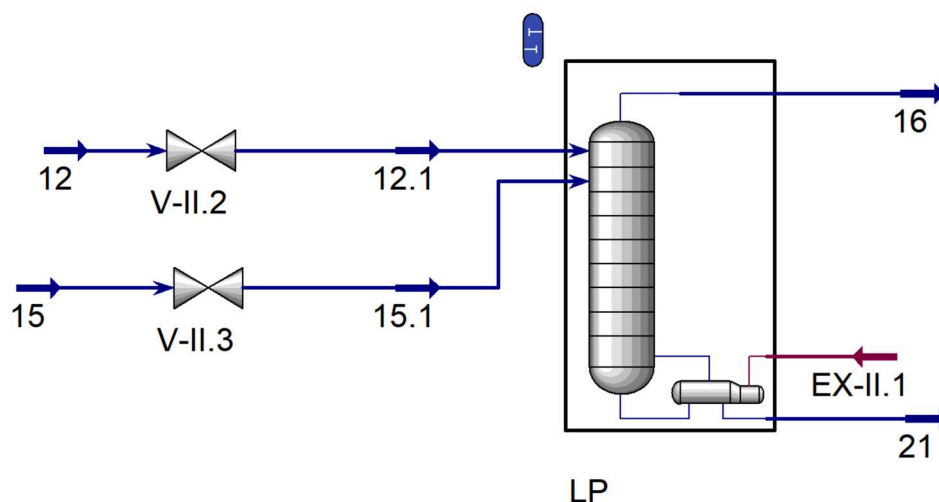


Fig.II.5. Diagrama de flujo para la simulación de la columna LP en Aspen HYSYS

Se indicará que toda la columna opere a 1.2 atm, con una eficacia de plato del 70% y como hervidor se elegirá un calderín convencional de HYSYS. Así mismo se indicará que la corriente 12.1 entre por la parte superior de la columna. En el apartado de restricciones (Monitor) se introducirán como tal la cantidad de nitrógeno objetivo en el destilado (458.5 kmol/h). La operación se optimizará en base al número de platos y el plato óptimo en el que introducir como alimentación la corriente 15.1 que permitan reducir al mínimo la cantidad de oxígeno en el destilado, sin que el número de etapas teóricas se dispare.

Para llevar a cabo este procedimiento, se realizarán múltiples simulaciones. En primer lugar se fija el número de platos (se han considerado 50, 40, 35 y 30 platos) y para cada número de platos, se calcula la fracción molar de oxígeno a la salida, en base a la situación del plato de alimentación. En cada caso, se considera que el plato óptimo de alimentación es

aquel que permite obtener un valor mínimo de fracción molar de oxígeno. Los resultados obtenidos para los diferentes números totales de platos se muestran en la Figura II.6.

Puesto que los resultados de la simulación son muy extensos, se mostrarán los resultados para el plato de alimentación óptimo para cada caso en la Tabla II.III, mientras el resto se recopilará en la Tabla II-B.II del Apéndice II-B.

Tabla II.III. Concentraciones de oxígeno a la salida en función del número de platos. Para cada caso, se muestra también cual sería el plato óptimo de alimentación.

Número de platos	Plato de alimentación	C _{O₂} (ppm)
50	35	31.73
40	26	31.73
35	23	31.81
30	21	33.25

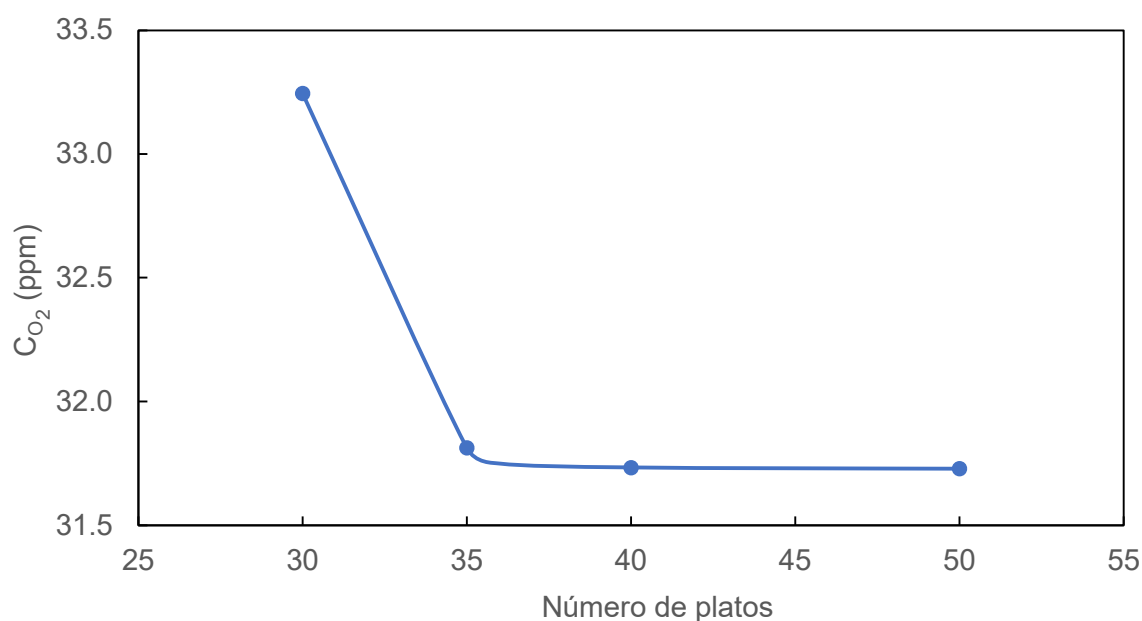


Fig.II.6. Gráfica comparativa entre el número de platos y la concentración en ppm mínima de oxígeno en cada caso

A partir de los resultados obtenidos, se escogerá el valor óptimo de 35 platos y el plato de alimentación número 23 contando desde la parte superior de la columna. Se ha tomado dicho valor como óptimo debido a que es el valor para el que se observa que la fracción molar de oxígeno comienza a necesitar un aumento de platos significativo para lograr una reducción en la concentración extremadamente pequeña.

Los resultados finales de la simulación se recogen en la Tabla II.IV.

Tabla II.IV. Flujos molares de las corrientes, obtenidos como resultado de la simulación de la LP por Aspen HYSYS

Corriente	12.1	15.1	16	17	20
Flujo molar (kmol/h)					
N ₂	266.0	192.5	458.5	5.65 10 ⁻²	5.08 10 ⁻²
O ₂	2.66 10 ⁻²	123.0	1.51 10 ⁻²	408.9	285.9
Ar	0.1	5.4	0.1	23.8	18.4
TOTAL	266.1	320.9	458.6	432.7	304.3

La purga LOX (18) equivaldrá al 0.5% del flujo de la corriente 18:

$$\tilde{F}_{18} = 0.005 \tilde{F}_{17} = 2.164 \text{ kmol/h}$$

$$\tilde{F}_{19} = 432.7 - 2.164 = 430.6 \text{ kmol/h}$$

Por lo tanto, se tiene:

$$\tilde{F}_{21} = 430.6 - 304.3 = 126.3 \text{ kmol/h}$$

El reflujo de la LP se encuentra fijado por la corriente 12.1, ya que consiste en la fracción líquida obtenida tras la expansión isoentálpica de la corriente 12 a través de VLV-II.2.

$$\text{Reflujo} = 0.8409 (266.1) = 223.8 \text{ kmol/h}$$

Para la obtención de los requerimientos energéticos del calderín (EX-II.1), la corriente 17 sale de la columna en condiciones de líquido saturado y todo el calor necesario se utiliza en la evaporación total de la corriente 19. Su entalpía de vaporización se obtuvo de la base de datos de Aspen HYSYS con el modelo termodinámico Peng-Robinson, adecuado para operaciones criogénicas:

$$Q_{EX-II.1} = \tilde{F}_{19} \Delta H_{eb}$$

$$Q_{EX-II.1} = 430.6 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) 6\,683 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{h}} \right) = 2\,877\,700 \text{ kJ/h}$$

En la ventana 'internals' se llevará a cabo el cálculo del diámetro de la columna introduciendo el tipo de plato y el espaciado entre platos. El espaciado será de 0.6350 m pero en el tipo de plato no deja introducir platos de válvula por lo que se realizará la simulación con platos perforados teniendo en cuenta que habrá cierto error respecto al resultado real.

Los resultados de la simulación estiman una altura de columna de 22 m y un diámetro de 0.96 m, lo que se traduce en una relación H/D de 23, que está dentro de lo habitual, según las heurísticas de Wallas.

II.3.2.2. Columna HP

Como se ha descrito anteriormente en el epígrafe II.3.1.1, la columna HP trabajará a 5 atm. El diseño de la columna se realizará a partir del método gráfico McCabe-Thiele para columnas de rectificación, para lo cual será se va a considerar que la mezcla es bicomponente (nitrógeno-oxígeno) y que el flujo de líquido y vapor a través de la columna se mantendrán constante. Esta última suposición es factible si los calores molares de las fases vapor y líquido, para distintas composiciones se mantienen constantes, que es la principal premisa en la que se basa el método McCabe-Thiele. Se han realizado varias simulaciones con el programa informático Aspen HYSYS para obtener los datos termodinámicos y estos se representan en la Figura II.7:

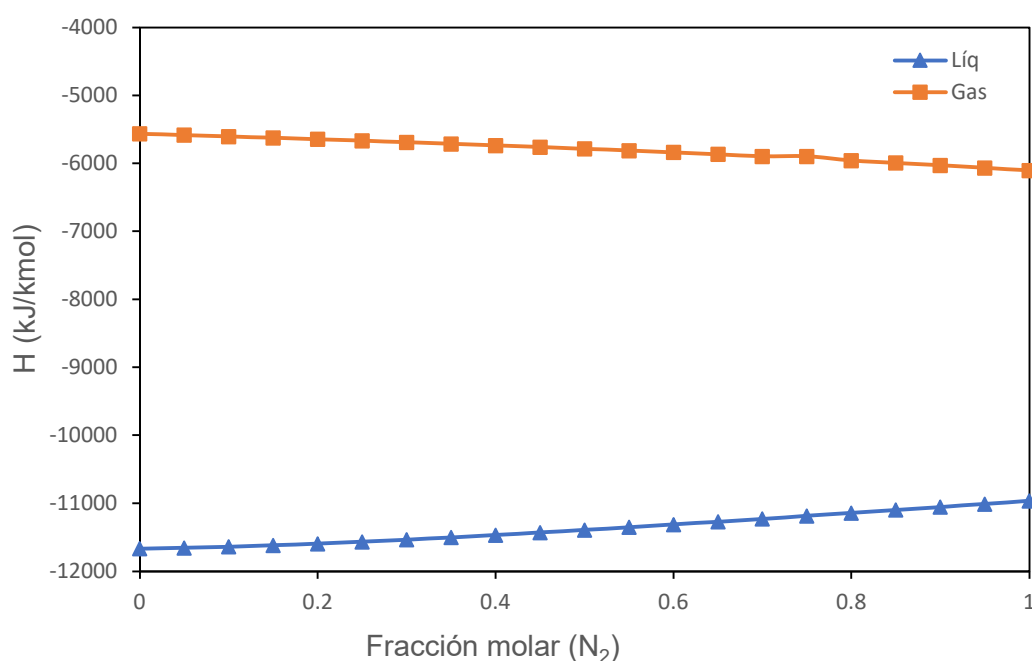


Fig.II.7. Entalpías de líquido saturado y vapor saturado para mezclas N_2 - O_2 en todo el rango de composiciones, a 5 atm.

La desviación se encuentra dentro de un rango admisible, por lo que se puede considerar que se cumplen las premisas del método McCabe-Thiele.

Para aplicar el método, es necesario conocer los datos de equilibrio de la mezcla nitrógeno-oxígeno, que se obtendrán mediante la simulación por Aspen HYSYS con el modelo termodinámico Peng-Robinson y se recogen en la Tabla II-B.III del Apéndice II-B.

A partir de los datos de equilibrio se podrán construir los diagramas T-xy e y-x necesarios para la aplicación del método y que se representan en la Figura II.8 y Figura II.9 respectivamente.

A partir de los diagramas T-xy y x-y se obtienen las ecuaciones que relacionan la temperatura con las composiciones de equilibrio (Ecuación II.1 y II.2) y la composición de la fase líquida en equilibrio con la composición de la fase vapor (Ecuación II.3).

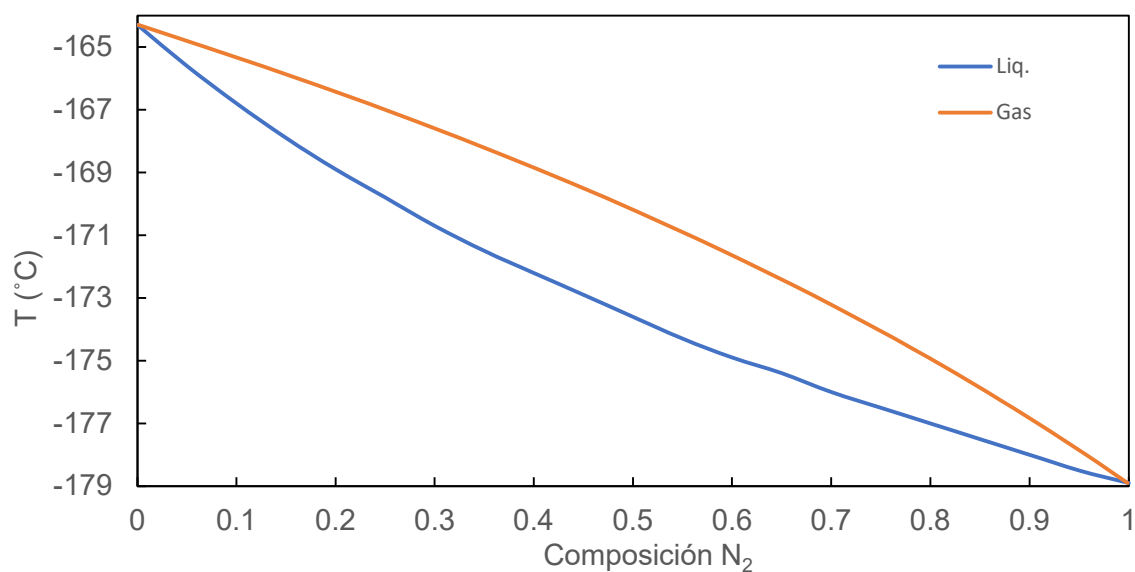


Fig.II.8. Diagrama T-xy de la mezcla N₂-O₂

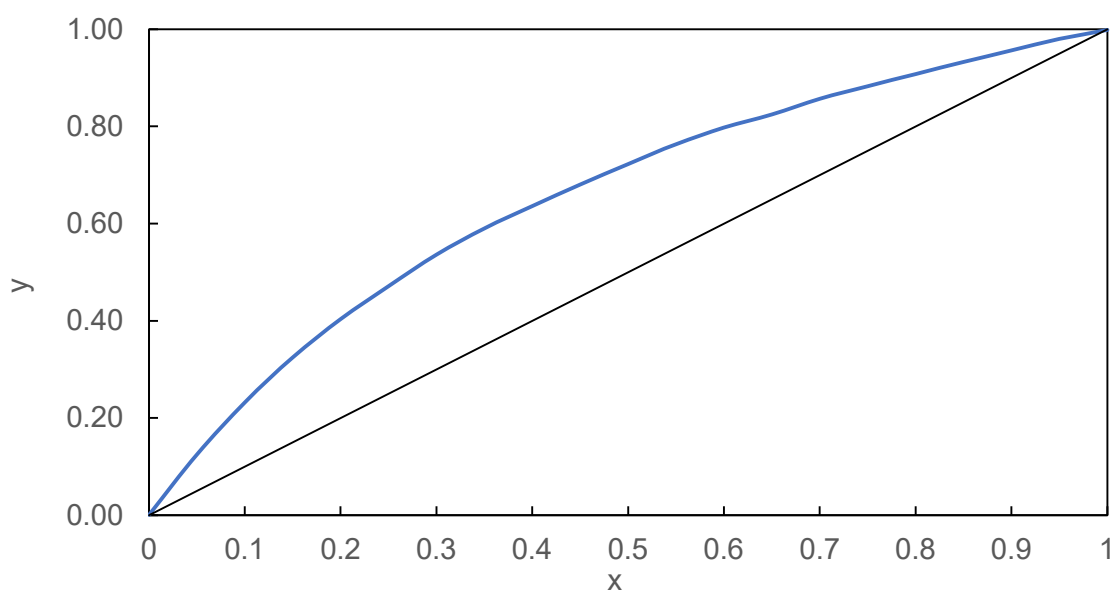


Fig.II.9. Diagrama x-y de la mezcla N₂-O₂

$$T = -1.191y^4 - 0.4409y^3 - 2.930y^2 - 10.08y - 164.3 \quad [\text{II.1}]$$

$$T = -6.521x^3 + 17.72x^2 - 25.80x - 164.4 \quad [\text{II.2}]$$

$$y = 1.0834x^5 - 3.6601x^4 + 5.2271x^3 - 4.3606x^2 + 2.7104x \quad [\text{II.3}]$$

Partiendo de los datos de las corrientes 12.1 y 15.1 obtenidos en la simulación de la LP (Tabla II.IV), se puede obtener el flujo molar de la corriente de alimentación de la HP haciendo un balance de materia a la columna y siendo fijas las fracciones molares de nitrógeno de cada una de las corrientes.

$$\tilde{F}_9 = \frac{266.1 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) 0.9995 + 320.9 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) 0.6}{0.7811} = 587 \text{ kmol/h}$$

El primer paso consistirá en trazar la recta de operación correspondiente a la alimentación, que tendrá como punto de inicio las coordenadas (0.7811, 0.7811). La pendiente de la recta de operación de la alimentación depende de la fracción líquida de la misma (q). Para calcularla se utilizará el diagrama de Hausen anteriormente definido en el epígrafe II.1.1.1, trazando el recorrido que sigue la corriente 9 durante el proceso de licuefacción parcial, obteniendo así la Figura II.10.

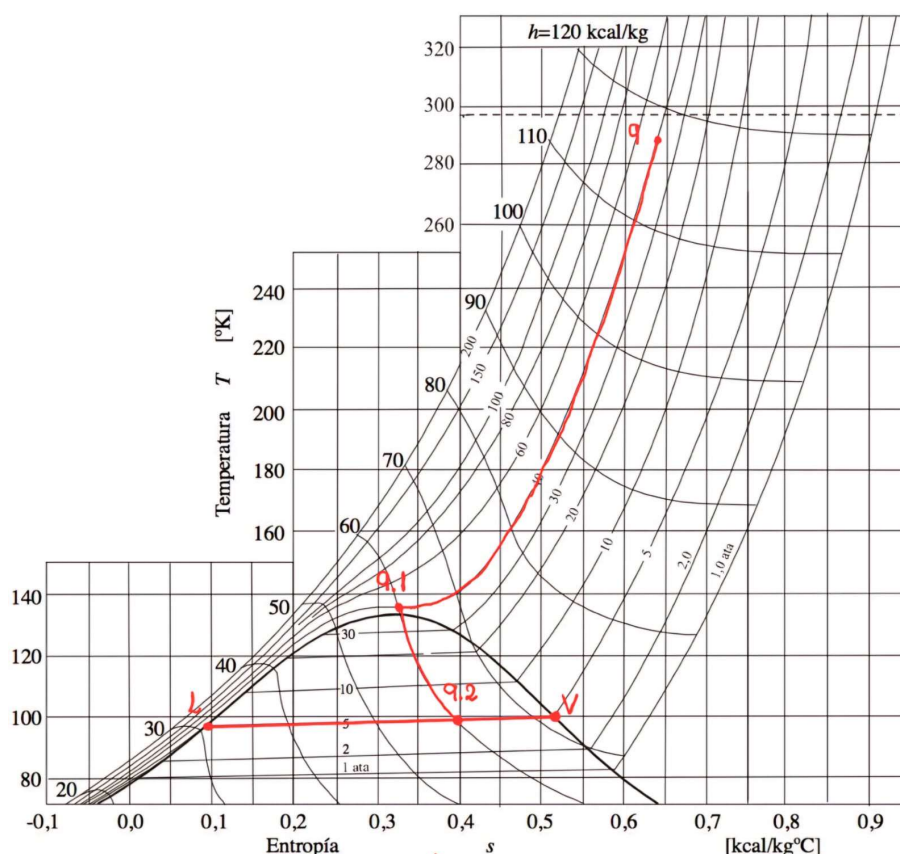


Fig.II.10. Diagrama de Hausen con recorrido de operaciones trazado

Como se puede observar, el tramo de 9 a 9.1 corresponde al enfriamiento isobaro mientras que de 9.1 a 9.2 se tiene la expansión isoentálica. La fracción de líquido se puede obtener realizando una sencilla regla de la palanca entre los puntos L, 9.2 y V, obteniendo la ecuación II.4.

$$q = \frac{\dot{H}_V - \dot{H}_{9,2}}{\dot{H}_V - \dot{H}_L} \quad [\text{II.4}]$$

Obteniendo los valores de entalpía de la Figura II.10 e introduciéndolos en la ecuación II.4 se obtiene:

$$q = \frac{71 - 60}{71 - 33} = 0.2895$$

Por lo tanto, la ecuación de la recta de alimentación será:

$$y = \frac{q}{q-1}x - \frac{1}{q-1}x_9$$

$$y = -0.4074x + 1.099 \quad [\text{II.5}]$$

Generalmente el reflujo de operación en la columna HP se obtendría calculando primero el reflujo mínimo de forma gráfica por McCabe-Thiele y multiplicándolo por un factor que permite obtener el valor de reflujo óptimo para la operación. Sin embargo, en este caso la optimización ya se ha llevado a cabo en la columna LP y debido a que el balance energético del hervidor-condensador (EX-II.1) debe quedar perfectamente cerrado, el reflujo de operación se obtendrá directamente igualando el requerimiento energético del calderín de la LP con el calor de condensación total de la corriente 10. La entalpía de condensación se obtuvo mediante la base de datos de Aspen HYSYS.

$$2\,877\,700 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{h}} \right) = \tilde{F}_{10} \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) 4\,861 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right)$$

$$\tilde{F}_{10} = 592.0 \text{ kmol/h}$$

$$\tilde{F}_{11} = 592.0 - 266.1 = 325.9 \text{ kmol/h}$$

De esta forma la relación de reflujo de operación es la siguiente:

$$R_{op} = \frac{325.9}{266.1} = 1.224$$

Y por tanto la pendiente de la recta de enriquecimiento de operación (L/G) es:

$$y = \frac{R}{R+1}x + \frac{1}{R+1}x_{12}$$

$$\frac{L}{G} = \frac{1.224}{1 + 1.224} = 0.5504$$

$$\frac{1}{R+1}x_{12} = \frac{1}{1.224 + 1} 0.9995 = 0.4496$$

Obteniéndose así la Ecuación II.6:

$$y = 0.5504x + 0.4496 \quad [\text{II.6}]$$

Para comprobar que la relación de reflujo de operación no se encuentre por debajo de la mínima, se igualan las Ecuaciones II.3 (línea de equilibrio) y II.5 (línea de operación de alimentación) se obtiene el punto de intersección (0.6572, 0.8316) que permite obtener la recta de enriquecimiento mínimo uniendo dicho punto con las coordenadas (0.9995, 0.9995) correspondientes al destilado. A partir de los dos puntos mencionados se puede hallar la Ecuación II.7 de enriquecimiento mínimo.

$$y = 0.4906x + 0.5092 \quad [\text{II.7}]$$

De esta forma se puede hallar que el factor aplicado a la relación de reflujo mínima es de 1.27.

Igualando la recta de enriquecimiento (Ecuación II.6) con la recta de alimentación (Ecuación II.5) se obtiene el punto de intersección (0.6787, 0.8228). Este punto de intersección se une por una recta con el punto correspondiente al residuo (0.6000, 0.6000) para obtener la recta de agotamiento, que se representa mediante la ecuación II.8.

$$y = \frac{\tilde{F}_{13}}{\tilde{F}_{14}}x - \frac{\tilde{F}_{15}}{\tilde{F}_{14}}x_{15}$$

$$y = 2.829x - 1.097 \quad [\text{II.8}]$$

Conociendo la ordenada en el origen de la recta de agotamiento se puede calcular el flujo molar de la corriente 14.

$$\tilde{F}_{14} = \frac{(320.9) 0.6}{1.097} = 175.5 \text{ kmol/h}$$

$$\tilde{F}_{13} = 320.9 + 175.5 = 496.4 \text{ kmol/h}$$

Con $\tilde{F}_{14}$ y la entalpía de vaporización de la corriente 13, obtenida a partir de la base de datos de Aspen HYSYS, se pueden calcular los requerimientos energéticos del hervidor (RE-II.1)

$$Q_{RE-II.1} = 175.5 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) 5370 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right) = 942435.0 \text{ kJ/h}$$

A partir de la Ecuación II.5, II.6 y II.8, se pueden calcular de forma manual los platos necesarios. Los resultados de dicho cálculo debido a su extensión se recogerán en la Tabla II-B.I del Apéndice II-B. Se representan todos los resultados de forma gráfica en la Figura II.11.

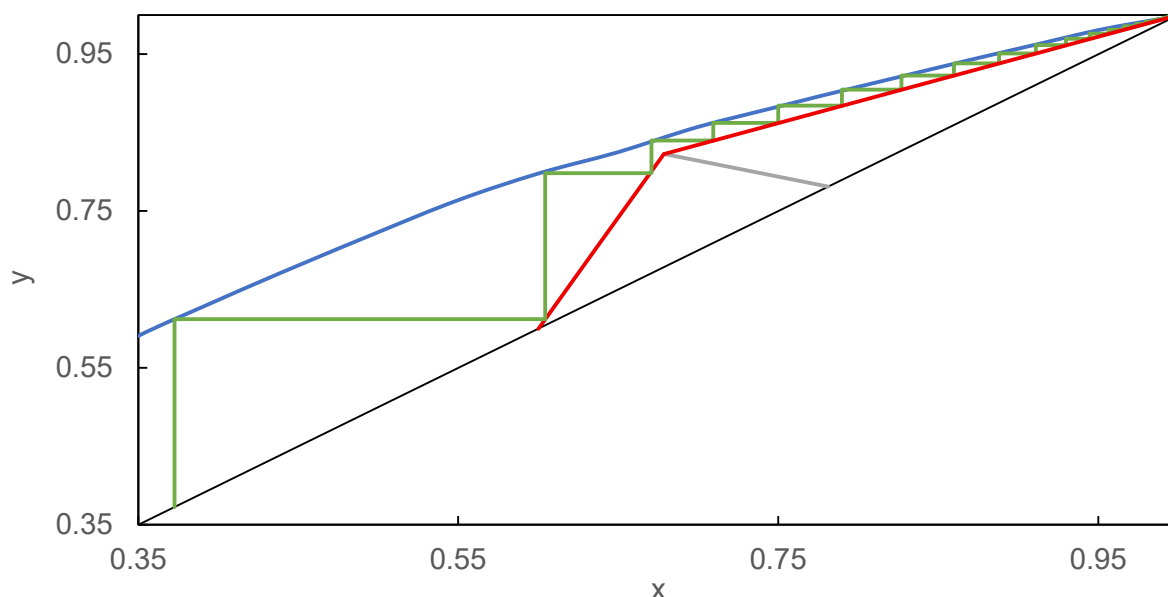


Fig.II.11. Diagrama y-x con las rectas de operación y los platos teóricos trazados, empleando el método McCabe-Thiele

Se obtuvieron 23 etapas teóricas, de las cuales una corresponde al calderín y 22 son los platos. El plato de alimentación será el penúltimo plato (el segundo más cercano al calderín). Aplicando la eficacia global de plato del 60% se tiene:

$$N_{real} = \frac{22}{0.6} = 36.66 \text{ platos}$$

A continuación se aplica un factor de seguridad del 10% tal y como se indica en las heurísticas de operaciones de destilación (Walas, 1990):

$$N_{real} = (36.66) 1.1 = 40.33 \approx 41 \text{ platos reales}$$

Finalmente, para la obtención del diámetro de la columna se recurrirá al uso del diagrama de Fair, que se puede observar en la Figura II.12, que nos permite calcular las condiciones de inundación en función de los flujos de líquido y gas a través de la columna.

En abscisas se requerirá calcular previamente el factor de flujo (F_{LV}) mediante los flujos másicos de vapor y de líquido en la sección de enriquecimiento (el flujo de vapor es mucho mayor). Las propiedades de los fluidos necesarias para el cálculo se obtendrán a partir de simulación por Aspen HYSYS.

$$F_{LV} = \frac{325.9 \left(\frac{kmol}{h} \right) 28.02 \left(\frac{kg}{kmol} \right)}{592.0 \left(\frac{kmol}{h} \right) 28.93 \left(\frac{kg}{kmol} \right)} \left(\frac{20.46 \left(\frac{kg}{m^3} \right)}{722.5 \left(\frac{kg}{m^3} \right)} \right)^{0.5} = 0.09$$

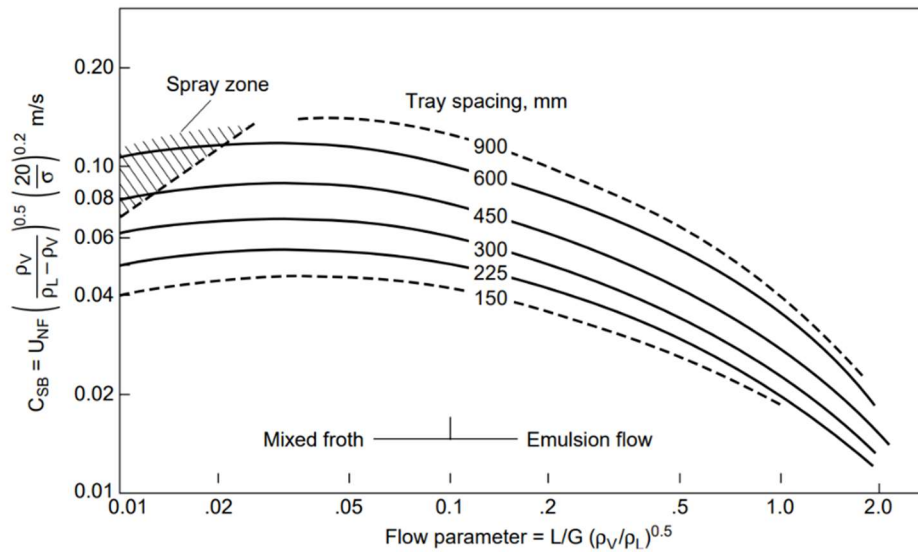


Fig.II.12. Diagrama de inundación de Fair (Perry y Green, 1997)

Introduciendo dicho valor en abscisas y usando la curva para 600 mm de espaciado de plato, se obtiene el valor de ordenadas de 0.101, del cual tras despejar U_{NF} en la ecuación representada en ordenadas, se puede obtener la velocidad de inundación.

Considerando los valores ya definidos de densidades y un valor de la tensión superficial (σ) de 9.173 dina/cm, se obtiene la siguiente velocidad de inundación:

$$U_{NF} = 0.506 \text{ m/s}$$

Para la velocidad superficial del vapor se tomará el 70% de la velocidad de inundación:

$$U_{NFop} = (0.506) 0.7 = 0.354 \text{ m/s}$$

Y por lo tanto el área neta de flujo de vapor será la siguiente:

$$A_{neta} = \frac{592.0 \left(\frac{kmol}{h} \right) 28.93 \left(\frac{kg}{kmol} \right) \frac{1 m^3}{20.46 kg} \frac{1 h}{3600 s}}{0.354 \left(\frac{m}{s} \right)} = 0.66 m^2$$

Como se indicó anteriormente en el apartado II.3.1.1, se considera que el vertedero ocupa un 8.8% del área total, por lo que la relación área neta frente a área total será la siguiente:

$$\frac{A_{neta}}{A_T} = 1 - 0.088 = 0.912$$

Aplicándose la relación al área neta calculada anteriormente:

$$A_T = \frac{0.66}{0.912} = 0.72 m^2$$

Y por lo tanto despejando el diámetro de la ecuación del área de una sección circular:

$$D = \left[\frac{4 (0.72)}{\pi} \right]^{0.5} = 0.96 \text{ m}$$

Finalmente, se calculará la altura de la columna a partir del número de platos. Puesto que la distancia entre platos como especificado en el epígrafe II.3.1.1 es de 0.6350 m, se obtendrá el siguiente resultado:

$$H = (41 - 1) 0.6350 = 25.4 \text{ m}$$

En las heurísticas se detalla que para columnas con un diámetro de alrededor de 3 ft (0.9144 m) se deben añadir 4 ft (1.219 m) a la parte superior para la retirada del vapor y 6 ft (1.829 m) en la parte inferior para el nivel del líquido y el retorno de vapor desde el hervidor, con lo que la altura real de la columna será:

$$H_{real} = 25.4 + 1.2 + 1.8 = 28.4 \text{ m}$$

II.3.2.3. RE-II.1

Para el diseño del hervidor de la columna HP, el requerimiento energético ha sido calculado en el apartado II.3.2.2, puesto que el fluido que se encuentra en la parte externa del tubo (corriente 13) se someterá a un cambio de fase, su temperatura se mantendrá constante en -174.9 °C para mantenerla saturada (valor obtenido de la Figura II.8 para una fracción molar de 0.6 en la curva de líquido saturado). Para la corriente que se enfría (9) se conoce su temperatura de salida aproximada a partir del diagrama de Hausen (-136 °C), por lo que sabiendo que la capacidad calorífica del aire a 40 atm es 31.36 kJ/kg °C mediante la base de datos de Aspen HYSYS, se puede calcular la temperatura de entrada aproximada de la siguiente forma:

$$\Delta T = \frac{942\,435 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{h}} \right)}{31.36 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot ^\circ\text{C}} \right) 587 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right)} = 51.2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$T_{in} = -136.0 + 51.25 = -84.8 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Para el cálculo del área del intercambiador se deberá utilizar la ecuación de diseño (Ecuación I.21). El coeficiente U se obtendrá a partir de las heurísticas de intercambiadores de calor (Walas, 1990), que para un calderín será de 200 Btu/h ft² °F (5.678 W/m² K) y el incremento de temperatura logarítmicos se obtendrá de la siguiente forma.

$$\Delta T_{ln} = \frac{(188.2 - 98.1) - (137 - 98.1)}{\ln \left(\frac{188.2 - 98.1}{137 - 98.1} \right)} = 60.96 \text{ K}$$

De esta forma se obtiene la siguiente área de intercambio:

$$A = \frac{942\,435 \left(\frac{kJ}{h}\right) \frac{10^3 J}{1 kJ} \frac{1 h}{3\,600 s}}{5.678 \left(\frac{W}{m^2 K}\right) 60.96 (K)} = 756.3 m^2$$

II.3.2.4. EX-II.1

Para este caso, puesto que el intercambio de calor se produce completamente por cambios de fase tanto de la corriente caliente como de la corriente fría las temperaturas a ambos lados del intercambiador se mantendrán constantes. En el caso de la condensación (corriente 10), si se observa la Figura II.8, para un líquido saturado de fracción molar 0.9995, la temperatura de equilibrio será de -178.9 °C; con respecto a la temperatura de evaporación de la corriente 19, esta se obtiene a partir de la simulación realizada en Aspen HYSYS, resultando de -181.6 °C.

Para que únicamente se produzca el cambio de fase de ambas corrientes, sin cambios de temperatura, el calor de condensación de la corriente 10 debe de ser igual al calor de evaporación de la corriente 19. Para ello, se ha optimizado el flujo de entrada de la corriente 10 variando la relación de reflujo de la columna HP.

Para la obtención del área de intercambio, al igual que para RE-II.1, se recurrirá a la Ecuación I.21. En este caso puesto que se produce evaporación y condensación y por tanto las temperaturas se mantienen constantes, se toma como incremento de temperatura logarítmico la diferencia de temperatura entre ambos medios. La U a su vez se deberá calcular como la inversa del sumatorio de las resistencias a la transmisión de calor, considerando despreciables la resistencia por convección del fluido y por conducción de los tubos, debido a que el orden de magnitud para los coeficientes de condensación y evaporación son mucho mayores.

Los valores de los coeficientes de transmisión de calor por condensación y por evaporación se encuentran tabulados, tomándose un valor intermedio de $4.5 \cdot 10^3 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ para el nitrógeno condensante y $2.5 \cdot 10^3 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ para el oxígeno que se evapora. (Peters *et al.*, 2003)

$$U = \frac{1}{\frac{1}{4.5 \cdot 10^3} + \frac{1}{2.5 \cdot 10^3}} = 1\,607.1 \frac{W}{m^2 K}$$

$$A = \frac{430.6 \left(\frac{kmol}{h}\right) 6\,683 \left(\frac{kJ}{kmol}\right) \frac{10^3 J}{1 kJ} \frac{1 h}{3\,600 s}}{1\,607.1 \left(\frac{W}{m^2 K}\right) (-178.9 + 181.6) (K)} = 184.2 m^2$$

II.4. DISEÑO MECÁNICO

II.4.1. DISEÑO MECÁNICO DE LA COLUMNA HP

Para la columna de alta presión, se tomará una geometría cilíndrica del cuerpo de la torre como es común en la mayor parte de columnas de destilación a escala industrial. Se dispondrá de forma vertical y se diseñarán los cabezales con una geometría toro esférica, que posee suficiente material para soportar la presión a la que se encuentra la columna, pero no utiliza tanto como la geometría esférica por lo que el coste será menor.

Para un cálculo preciso será necesario conocer el material con el que se va a trabajar. Debe tratarse de un material capaz de soportar la corrosión y mantener una buena tenacidad incluso a temperaturas criogénicas, muy por debajo de los 0 °C. Se ha consultado la parte D-sección II del manual ASME (2019) respecto a materiales para hervidores y recipientes a presión y se ha determinado que una buena opción sería una aleación de acero inoxidable SA-240 316L (UNS S31603) que permite operar desde 50 °C hasta -196 °C con un esfuerzo permisible de hasta 90 MPa.

Siguiendo las heurísticas de recipientes a presión, se calculará la presión de diseño añadiendo un 10% de la presión máxima o 25 psi. La presión máxima a su vez se calcula añadiendo 25 psi a la presión de operación. De estas dos presiones de diseño se toma la mayor:

$$P_{m\acute{a}x} = 5 \text{ (atm)} + 25 \text{ (psi)} \frac{0.068 \text{ atm}}{1 \text{ psi}} = 6.7 \text{ atm}$$

$$P_{dis_1} = 1.1 (6.7) = 7.37 \text{ atm}$$

$$P_{dis_2} = 6.7 \text{ (atm)} + 25 \text{ (psi)} \frac{0.068 \text{ atm}}{1 \text{ psi}} = 8.4 \text{ atm} = 851.1 \text{ kPa}$$

Para el cálculo del grosor del cuerpo cilíndrico se utilizará la Ecuación I.25 que se ha descrito en la sección I de este trabajo. Puesto que se trabaja a 5 atm convendrá utilizar un valor de eficiencia de juntas (E_j) de 1, es decir, para el caso de juntas totalmente radiografiadas y puesto que el oxígeno tiene carácter oxidante se dará un margen para corrosión de 0.38 mm.

$$t = \frac{851.1 \text{ (kPa)} \left(\frac{0.96}{2} \right) \text{ (m)}}{9 \cdot 10^4 \text{ (kPa)} - 0.6 \cdot 851.1 \text{ (kPa)}} + 0.38 \cdot 10^{-3} \text{ (m)} = 4.95 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

Para el grosor de los cabezales toro esféricos se utilizará la Ecuación II.10 que se puede encontrar en el manual ASME para recipientes a presión (2021).

$$t = \frac{0.885 P L_a}{S E_f - 0.1 P} + C_c \quad [\text{II.10}]$$

Los términos son los mismos que para la Ecuación I.17, exceptuando L_a que será el radio de la corona interior de la cabeza toro esférica antes de añadir el margen para corrosión y se considerará igual al radio r_i .

$$t = \frac{0.885 \cdot 851.1 \text{ (kPa)} \left(\frac{0.96}{2} \right) \text{ (m)}}{9 \cdot 10^4 - 0.1 \cdot 851.1 \text{ (kPa)}} + 0.38 \cdot 10^{-3} \text{ (m)} = 4.40 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

De estos dos valores de grosor se tomará por tanto el mayor, en este caso el de $4.95 \cdot 10^{-3} \text{ m}$.

También se debe calcular el peso de la carcasa cilíndrica y de los cabezales toro esféricos. Para poder obtener el volumen de los cabezales se recurre a la Ecuación II.19 y II.20 del manual ASME de recipientes a presión (2021).

$$V = 0.9 \left(\frac{2\pi L_a^2}{3} IDD \right) \quad [\text{II.11}]$$

$$IDD = L_a - [(L_a - r)^2 - (L_a - t - r)^2]^{1/2} \quad [\text{II.12}]$$

Siendo:

IDD: profundidad interior de plato (m)

L_a : radio interior de corona del cabezal toro esférico ($L_a = r_i$, m)

r_i : radio interior del cuerpo cilíndrico, antes de añadir el espesor por corrosión (m)

r : radio de curvatura ($r = 6\%$ del r_i , m)

t : espesor (m)

Se calcula el volumen total (cuerpo y cabezales) y se multiplicará por la densidad aproximada del acero 316 ($8\,000 \text{ kg/m}^3$). Conociendo el peso total se tiene en cuenta un 20% más (por disposición vertical) para considerar accesorios, obteniéndose los siguientes resultados.

$$IDD = 0.48 - [(0.48 - 0.0288)^2 - (0.48 - 4.95 \cdot 10^{-3} - 0.0288)^2]^{0.5} = 0.413 \text{ m}$$

$$V_{TOTAL} = \pi \left(\frac{0.96^2}{4} - \frac{(0.96 - 2 \cdot 4.95 \cdot 10^{-3})^2}{4} \right) 28.4 + 2 \cdot 0.9 \left(\frac{2\pi \cdot 0.48^2}{3} \cdot 0.413 \right) = 0.780 \text{ m}^3$$

$$\text{kg de acero necesario} = \left(0.780 \text{ (m}^3) \cdot 8\,000 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \right) 1.2 = 7\,488.0 \text{ kg}$$

Los platos perforados tendrán medidas de 12.7 mm de diámetro de perforación y el área ocupada por los mismos representa el 10% del área activa según lo recomendado (Walas, 1990), resultando en 0.066 m² de área de huecos y 521 perforaciones por plato.

II.5. DIAGRAMA DE TUBERÍAS

Como se ha descrito en epígrafes anteriores, en sistemas en los que se trabaja en condiciones criogénicas se evita el uso de equipos de impulsión de fluidos para que no se produzcan fenómenos de cavitación que comprometan la integridad mecánica del sistema.

Debido a esta razón, se realizará la impulsión de los fluidos únicamente por gradientes de presión, lo que conlleva la necesidad de realizar un estudio prioritario del flujo en ciertos tramos de esta sección para asegurar que no se produce ningún problema.

Se dividirá el diagrama de flujo de la sección (Figura II.3) en tres tramos a estudiar:

1. Tramo 1 (formado por las corrientes 9, 9.1 y 9.2)
2. Tramo 2 (formado por las corrientes 10, 11, 12 y 12.1)
3. Tramo 3 (formado por las corrientes 13, 14, 15 y 15.1)

II.5.1. TRAMO 1

En este recorrido se tiene el aire como gas (fluido compresible), por lo tanto, se debe recurrir a un análisis previo de los números de Mach (Ma) en flujo adiabático. Para ello se utilizan las ecuaciones descritas a continuación (McCabe, 2007):

$$Ma = \frac{u}{u_s} \quad [\text{II.13}]$$

$$u_s = \left(\frac{\gamma P}{\rho} \right)^{1/2} \quad [\text{II.14}]$$

$$\frac{f \Delta L}{r_H} = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{Ma_A^2} - \frac{1}{Ma_B^2} - \frac{\gamma + 1}{2} \ln \frac{Ma_B^2 \{1 + [(\gamma - 1)/2] Ma_A^2\}}{Ma_A^2 \{1 + [(\gamma - 1)/2] Ma_B^2\}} \right) \quad [\text{II.15}]$$

$$\frac{P_A}{P_B} = \frac{Ma_B}{Ma_A} \sqrt{\frac{1 + [(\gamma - 1)/2] Ma_B^2}{1 + [(\gamma - 1)/2] Ma_A^2}} \quad [\text{II.16}]$$

$$\frac{T_A}{T_B} = \frac{1 + [(\gamma - 1)/2] Ma_B^2}{1 + [(\gamma - 1)/2] Ma_A^2} \quad [\text{II.17}]$$

$$f = \frac{0.25}{\left[\log_{10} \left(\frac{\epsilon/D}{3.7} + \frac{5.74}{Re^{0.9}} \right) \right]^2} \quad [\text{II.18}]$$

Donde:

γ : Coeficiente adiabático del aire (C_p/C_v)

u : velocidad del fluido (m/s)

u_s : velocidad local del sonido (m/s)

ϵ : Rugosidad de la tubería (m)

Re: Número de Reynolds

Inicialmente se considera un diámetro normalizado de 0.1 m (DN100). Puesto que el aire alcanzará temperaturas criogénicas, no se puede utilizar la ley de gases ideales por lo que las propiedades se obtendrán de la base de datos de Aspen HYSYS con el modelo termodinámico Peng-Robinson. Para todo tramo de tubería que no esté especificado por razones de diseño se considerará 10 m de separación entre equipos.

En cada sección de tubería se calcula el factor de fricción a partir de la Ecuación II.18, tomando como rugosidad 0.0015 mm correspondiente a acero inoxidable pulido (Perry y Green, 1997). A continuación, se calcula el Ma a la salida aplicando la Ecuación II.15, y con la Ecuación II.16 y II.17 se obtienen las variaciones en los distintos parámetros. Una vez calculados los parámetros, se comprueba a partir de la Ecuación II.13 y II.14 que el Ma recalculado coincide con el supuesto o existe un error mínimo.

El resultado de la primera sección de tubería (Entrada a sección II hasta la entrada a RE-II.1) se detalla en la Tabla II.V, en la que A hace referencia a la entrada a la sección II y B a la entrada a RE-II.1.

Tabla II.V. Resultado del análisis de Mach en la primera sección de tubería

	A	B
γ	1.488	1.488
T (°C)	15	15
P (kPa)	4 053.6	4 038.9
u_s (m/s)	350.7	350.7
u (m/s)	12.0	12.1
Ma	0.03425	0.03437
ρ (kg/m ³)	50.06	49.88
M (kg/kmol)	28.96	28.96

Como se puede observar, los números Ma son muy pequeños y la temperatura se mantiene constante, se procederá por tanto a simplificar los cálculos mediante el uso de balances de energía entre los puntos de inicio y final de cada sección.

$$P_A + \frac{1}{2}\rho_A u_A + \rho_A g h_A = P_B + \frac{1}{2}\rho_B u_B + \rho_B g h_B + 2\bar{\rho}f\left(\frac{L}{D}\right)\bar{u}^2 \quad [\text{II.19}]$$

Donde f es el factor de fricción, g es la aceleración gravitatoria (9.8 m/s^2) y $\bar{u}$ es la velocidad media en la tubería. Considerando la longitud del serpentín, se deberá tomar para el mismo un diámetro de 0.2 m para disminuir la caída de presión en lo posible, necesitando por tanto $1\,197 \text{ m}$ de serpentín. Entre la salida del intercambiador de calor y la válvula habrá un aumento de altura de 2.5 m que será la L en esa sección. La válvula (VLV-II.1) debe encontrarse lo más próxima posible a la entrada a la torre para mantener las condiciones exigidas en la alimentación, por lo que dicha sección no se tendrá en cuenta. Se obtiene así la Tabla II.VI. Siendo A, la entrada a la sección II, B la entrada a RE-II.1, C la salida de RE-II.1, D la entrada a VLV-II.1 y E la salida de VLV-II.1.

Tabla II.VI. Resultados del análisis de flujo en el tramo 1

	A	B	C	D	E
T (°C)	15	15	-136	-136	-174
P (kPa)	4 053.6	4 048.0	4 024.8	4 024.4	506.6
D (m)	0.1	0.2	0.2	0.1	0.1
A (m ²)	$7.9 \cdot 10^{-3}$	$3.1 \cdot 10^{-2}$	$3.1 \cdot 10^{-2}$	$7.9 \cdot 10^{-3}$	$7.9 \cdot 10^{-3}$
ρ (kg/m ³)	50.1	50.0	206.6	208.9	28.79
u (m/s)	12.0	3.0	0.73	2.88	20.88
Re	$3.13 \cdot 10^6$	$1.57 \cdot 10^6$	$2.16 \cdot 10^6$	-	-
LOG	-4.90	-4.75	-4.86	-	-
f	0.0104	0.0111	0.0106	-	-
ΔP (kPa)	5.6	23.1	0.4	-	-
μ (Pa s)	$1.92 \cdot 10^{-5}$	$1.92 \cdot 10^{-5}$	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$1.13 \cdot 10^{-4}$
L (m)	10	1 197	2.5	-	-

Por otra parte, se puede calcular la constante de la válvula (VLV-II.1) mediante la siguiente ecuación.

$$\Delta P = \rho_s \left(\frac{\check{F}}{K_v} \right)^2 \quad [\text{II.20}]$$

Donde K_v se corresponde al coeficiente de caudal en unidades métricas ($\text{m}^3/\text{h bar}^{1/2}$), $\check{F}$ es el caudal de flujo (m^3/h), el incremento de presión se mide en bar y ρ_s es la densidad relativa del fluido respecto a la densidad del agua (1000 kg/m^3).

Aplicando por tanto la Ecuación II.20 se obtiene una K_v de $4.73 \text{ m}^3/\text{h bar}^{1/2}$.

II.5.2. TRAMO 2

Para el siguiente tramo se debe tener en cuenta que se trabaja con la corriente en estado líquido (incompresible), por lo tanto, si se mantiene el mismo diámetro a lo largo de la tubería al aplicar la Ecuación II.19, los términos de energía cinética se anulan. A su vez se debe considerar que las corrientes 10 y 11 no se tendrán en cuenta en el cálculo. Esto se debe a que la corriente 11 que corresponde al reflujo volverá a la torre por gravedad desde EX-II.1 y respecto a la corriente 10, puesto que el intercambiador consta de una gran cantidad de tubos, no se conoce el número exacto ni su longitud y el área de intercambio de calor es suficientemente pequeña, se considerará la caída de presión despreciable.

A diferencia del tramo 1, debido a que el fluido se encuentra en condiciones de saturación y se requiere que supere una altura de 22 m (Altura de la LP) la caída de presión causaría que se vaporice completamente lo que afectaría enormemente a la eficacia de la columna. Debido a esto, en lugar de colocar la válvula de expansión justo antes del plato de alimentación de la LP, se coloca inmediatamente después del EX-II.1. De esta forma la expansión generará frío por el efecto Joule-Thomson y a su vez se vaporizará solo la cantidad deseada del fluido. La mezcla líquido-gas disminuirá su densidad eficaz enormemente, lo que permitirá el flujo desde la válvula hasta la alimentación con pérdidas de presión por altura mínimas. Utilizando la Ecuación II.18, II.19 y II.20 se obtienen los siguientes resultados, que se muestran en la Tabla II.VII, en la que F es la entrada a la válvula VLV-II.2, G la salida de VLV-II.2 y H la entrada a la columna LP.

Tabla II.VII. Resultados del análisis de flujo en el tramo 2

	F	G	H
T (°C)	-179.0	-192.7	-192.7
P (kPa)	506.6	144.3	121.6
D (m)	0.1	0.1	0.1
A (m ²)	0.0079	0.0079	0.0079
ρ (kg/m ³)	722.6	42.0	36.08
u (m/s)	0.4	6.3	7.3
Re	$2.62 \cdot 10^5$	$1.80 \cdot 10^5$	$1.72 \cdot 10^5$
LOG	-	-3.95	-
f	-	0.0160	-
ΔP (kPa)	-	22.7	-
μ (Pa s)	$1.01 \cdot 10^{-4}$	$1.47 \cdot 10^{-4}$	$1.54 \cdot 10^{-4}$
L (m)	-	22	-

$$K_{v,V-II.2} = 3.35 \frac{m^3}{h \sqrt{bar}}$$

II.5.3. TRAMO 3

En este recorrido, las corrientes 13 y 14 no se tendrán en cuenta en el análisis, puesto que la primera al ser RE-II.1 un serpentín, el fluido se considerará estático y la segunda asciende a través de la propia columna por convección natural. Para el resto, se sigue el mismo razonamiento y metodología de cálculo que en el tramo 2, considerando que la altura a subir son 35 m (Altura de la HP + espaciado correspondiente a 11 platos de la LP). Los resultados del análisis se pueden observar en la Tabla II.VIII, Siendo I la entrada a la válvula VLV-II.3, J la salida de VLV-II.3 y K la entrada a la columna LP.

Tabla II.VIII. Resultados del análisis de flujo en el tramo 3

	I	J	K
T (°C)	-174.9	-187.4	-187.4
P (kPa)	506.6	171.1	121.6
D (m)	0.1	0.1	0.1
A (m ²)	0.0079	0.0079	0.0079
ρ (kg/m ³)	847.6	57.3	41.4
u (m/s)	0.4	5.9	8.2
Re	2.92 10 ⁵	2.10 10 ⁵	1.92 10 ⁵
LOG	-	-4.01	-
f	-	0.0156	-
ΔP (kPa)	-	49.5	-
μ (Pa s)	1.16 10 ⁻⁴	1.60 10 ⁻⁴	1.76 10 ⁻⁴
L (m)	-	35	-

$$K_{v,V-II.3} = 4.14 \frac{m^3}{h \sqrt{bar}}$$

II.6. EVALUACIÓN ECONÓMICA

Para calcular los costes de inversión se utilizarán los índices CEPCI indicados en la sección I de este trabajo, así como la Ecuación I.27 y la tasa euro-dólar indicada en la misma.

II.6.1. COLUMNAS

El coste de las columnas se debe obtener a partir de la Figura II-B.1 y la Figura II-B.2 (Peters *et al.*, 2003) del Apéndice II-B.

Se puede obtener el precio de la columna en la Figura II-B.1 a partir de la masa de acero necesaria y el material utilizado, sin incluir el coste de instalación. A su vez, conociendo el tipo de plato utilizado, el material y el diámetro, se puede obtener el coste por plato en la Figura II-B.2. Tras sumar ambos costes, se aplicará un factor de 1.5 debido a que el acero 316 elegido tiene características específicas para criogenia, pero no se conoce su precio. Finalmente se obtienen los resultados representados en la Tabla II.IX.

Tabla II.IX. Resultados del cálculo de los costes de las columnas HP y LP

Equipo	H (m)	D (m)	t (m)	IDD (m)	Coste (k\$, 2002)	Coste (k\$, 2025)	Coste (k€, 2025)
HP	28.4	0.96	$4.95 \cdot 10^{-3}$	0.413	294.1	592.7	515.6
LP	22.0	0.96	$2.87 \cdot 10^{-3}$	0.429	229.9	463.2	403.0

II.6.2. VÁLVULAS

Para las válvulas puesto que no se ha podido obtener los precios de las válvulas específicas para el proceso se procederá a obtener un coste aproximado a partir de la Figura II-B.3 del Apéndice II.B, considerándose válvulas de globo en los tres casos. Sin embargo, para la válvula VLV-II.1, no sería correcto utilizar el precio directo de una válvula de tipo globo debido a la diferencia de complejidad respecto a una válvula de estrangulación o Joule-Thomson por lo que se aplicará un factor de 3 al precio original, y puesto que trabaja a una presión muy superior a la máxima indicada en la gráfica (2 070 kPa), se tomará el precio de la válvula con las especificaciones máximas y se aplicará un factor de escalado de 1.4. En las otras dos válvulas se tomará la de presión 860 kPa. Igual que en el epígrafe II.6.1, se deberá aplicar un factor por el material específico para criogenia, y puesto que en este caso en la

gráfica solo hay valores para acero al carbono, se aplicará un factor de 3. Los resultados del cálculo se encuentran en la Tabla II.X.

Tabla II.X. Resultados del cálculo de los costes de todas las válvulas utilizadas

Equipo	D (m)	Coste (k\$, 2002)	Coste (k\$, 2025)	Coste (k€, 2025)
VLV-II.1	0.1	15.1	30.5	26.5
VLV-II.2		0.9	1.8	1.6
VLV-II.3				

II.6.3. INTERCAMBIADORES DE CALOR

Para obtener el coste de EX-II.1, al necesitar un diseño personalizado no se ha podido encontrar un precio para el mismo, por lo que se tomará un valor aproximado de la Figura II-B.4 del Apéndice II-B correspondiente a cambiadores de calor de múltiples tubos para un área de 184 m² y el valor obtenido se multiplicará por un factor de material de 2.5 y, a su vez, se aplicará otro factor de 3 por ser un equipo a medida. A su vez, RE-II.1 al tratarse de un serpentín, se obtendrá su coste como el de una tubería de 1 197 m de longitud, 0.2 m de diámetro nominal y catálogo 40 a partir de la Figura II-B.5 del Apéndice II-B, considerando acero 304L que es suficiente para la temperatura y presión a las que se trabaja. Al resultado se le aplicará un factor de 1.25 por el uso de acero liso.

C-II.1 consistirá en un intercambiador de placas, ya que permite un intercambio de calor criogénico eficiente entre corrientes gaseosas (Barron, 1999). El coste se obtiene a partir de la Figura II-B.6 del Apéndice II-B, considerando que las placas son soldadas y el área de intercambio (22 m²) calculada en el Apéndice II-C, en la sección denominada 'Otros cálculos'. Al valor obtenido se le aplicará un primer factor de 3 debido a que la gráfica proporciona el coste para el equipo fabricado en acero al carbono, cuando el material real será acero 316L y un segundo factor de 1.5 por operación criogénica.

Tabla II.XI. Costes de los intercambiadores de calor

Equipo	Coste (k\$, 2002)	Coste (k\$, 2025)	Coste (k€, 2025)
RE-II.1	574.6	1 157.8	1 007.3
EX-II.1	255.0	513.9	447.1
C-II.1	8.1	16.3	14.2

II.7. BIBLIOGRAFÍA

ASPEN HYSYS. *Base de datos*. V11

BARRON, Randall F. *Cryogenic Heat Transfer*. Philadelphia: Taylor & Francis. 1999

CHAKRAVARTHY, Vijayaraghavan S. *Keynote Lecture: Developments in Falling Film Type (Downflow) Reboilers in the Air Separation Industry*. University at Buffalo, State University of New York. 2005. Found in: [Dc.engconfintl.org](https://doi.org/10.1002/9781118133222.ch10)

CHEN, Guang X. y CHUANG, Karl T. *Prediction of Point Efficiency for Sieve Trays in Distillation. Industrial & Engineering Chemistry Research*. 1993. Found in: [doi.org](https://doi.org/10.1021/ie00057a011)

KISTER, Henry Z. y GILL, David R. *Distillation Design*. New York: McGraw-Hill. 1992.

KUMAR, R.; HUGGAHALLI, M.; DENG, S. y ANDRECOVICH, M. *Trace Impurity Removal from Air*. The Netherlands: Kluwer Academic Publishers. 2003. Found in: [Link.springer.com](https://link.springer.com)

MCCABE, Warren L.; SMITH, Julian C. y HARRIOT, Peter. *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. 7ma Edición. México: McGraw.Hill. 2007

ORTUÑO, Ángel Vian. *Introducción a la Química Industrial*. 2da Edición. Barcelona: Reverté. 2012

PERRY, Robert H. y GREEN, Don W. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 7th ed. New York: McGraw-Hill, 1997.

PETERS, Max S.; TIMMERHAUS, Klaus D. y WEST, Ronald E. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. 5th ed. New York: McGraw-Hill, 2003.

SHELAT, Maulik R.; CHAKRAVARTHY, Vijayaraghavan S. y KWARK, Sang Muk. Patent number: *US9488408B2*. 2016. Found in: [doi.org](https://doi.org/10.1002/9781118133222.ch10)

THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS (ASME). *ASME Boiler & Pressure Vessel Code. Section II, Materials, Part D: Properties (Customary & Metric)*. 2019 ed. New York: ASME. 2019

THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS (ASME). *ASME Boiler & Pressure Vessel Code. Section VIII: Rules for Construction of Pressure Vessels. Division 1*. 2021 ed. New York: ASME. 2021

TREYBAL, Robert Ewald. *Operaciones de Transferencia de Masa*. 2da Edición. New York: McGraw-Hill. 1988

WALAS, Stanley M. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. Boston: Butterworth-Heinemann. 1990

APÉNDICE II-A: LISTA DE SÍMBOLOS

II-A.1. SÍMBOLOS LATINOS

A	Área
C_{sb}	Carga superficial de vapor
D	Diámetro
$\tilde{F}$	Flujo molar
$\check{F}$	Flujo volumétrico
F_{LV}	Factor de relación líquido-vapor
f	Factor de fricción
g	Aceleración gravitatoria
$\dot{H}$	Entalpía por unidad de masa
H	Altura de torre
K_v	Coefficiente de caudal
L	Longitud de tubería
M	Peso molecular
Ma	Número de Mach
N	Número de etapas
P	Presión
P_{dis}	Presión de diseño
$P_{m\acute{a}x}$	Presión máxima
Q	Calor
q	Fracción líquida
Re	Número de Reynolds
T	Temperatura
T_{in}	Temperatura de entrada
T_{out}	Temperatura de salida
U	Coeficiente global de transferencia de calor

U_{NF}	Velocidad superficial de vapor
u	Velocidad
u_s	Velocidad local del sonido
V	Volumen
x	Fracción molar de líquido
y	Fracción molar de vapor

II-A.2. SÍMBOLOS GRIEGOS

γ	Coeficiente adiabático del aire
ΔH_{eb}	Entalpía de vaporización
ΔL	Incremento de longitud de tubería
ΔT	Incremento de temperatura
ΔT_{ln}	Incremento de temperatura logarítmico
ϵ	Coeficiente de rugosidad de tubería
μ	Viscosidad
ρ	Densidad
ρ_s	Densidad relativa respecto del agua
σ	Tensión superficial

II-A.3 NOMENCLATURA PROPIA DEL ASME

E_J	Eficiencia de junta
IDD	Profundidad interior de plato
L_a	Radio interior de cabezal toro esférico
r	Radio de curvatura
r_i	Radio interior de columna
t	Grosor de pared

APÉNDICE II-B: TABLAS Y FIGURAS

II-B.1. TABLAS

Tabla II-B.I. Resultados del cálculo manual de los platos en la columna HP

Plato	y	x	Plato	y	x
	0.9995	0.9995		0.9693	0.9446
23	0.9995	0.9984	11	0.9693	0.9298
	0.9989	0.9984		0.9611	0.9298
22	0.9989	0.9971	10	0.9611	0.9111
	0.9982	0.9971		0.9508	0.9111
21	0.9982	0.9955	9	0.9508	0.8880
	0.9973	0.9955		0.9381	0.8880
20	0.9973	0.9935	8	0.9381	0.8599
	0.9962	0.9935		0.9227	0.8599
19	0.9962	0.9910	7	0.9227	0.8270
	0.9948	0.9910		0.9046	0.8270
18	0.9948	0.9879	6	0.9046	0.7898
	0.9931	0.9879		0.8841	0.7898
17	0.9931	0.9840	5	0.8841	0.7499
	0.9910	0.9840		0.8621	0.7499
16	0.9910	0.9793	4	0.8621	0.7094
	0.9884	0.9793		0.8398	0.7094
15	0.9884	0.9734	3	0.8398	0.6708
	0.9851	0.9734		0.7982	0.6708
14	0.9851	0.9658	2	0.7982	0.6043
	0.9810	0.9658		0.6121	0.6043
13	0.9810	0.9565	1	0.6121	0.3726
	0.9758	0.9565		0.3726	0.3726
12	0.9758	0.9446			

Tabla II-B.II. Resultados de la optimización del número de platos y el plato de alimentación para la obtención de concentración de oxígeno medida en ppm mínima en la corriente 16

Plato de alimentación	C _{O₂} (ppm)			
	50 platos	40 platos	35 platos	30 platos
15	-	-	-	43.20
17	-	-	35.14	35.14
19	32.58	32.58	32.59	33.25
20	-	32.18	-	-
21	31.97	-	31.97	164.56
22	-	31.85	-	-
23	31.79	-	31.81	63.06 10 ³
24	-	31.76	-	-
25	31.75	-	31.83	-
26	-	31.74	-	-
27	31.73	-	24.16 10 ³	-
28	-	31.73	-	-
29	31.73	-	10.83 10 ⁴	-
30	-	31.74	-	-
31	31.73	-	-	-
32	-	24.16 10 ³	-	-
33	31.73	-	-	-
34	-	10.83 10 ⁴	-	-
35	31.73	-	-	-
41	33.10	-	-	-

Tabla II-B.III. Datos de equilibrio de la mezcla N_2-O_2 obtenidos por simulación con Aspen HYSYS

T (°C)	x	y	T (°C)	x	y
-164.3	0.00	0.00	-174.3	0.55	0.76
-165.6	0.05	0.13	-174.9	0.60	0.80
-166.8	0.10	0.23	-175.4	0.65	0.83
-167.9	0.15	0.32	-176.0	0.70	0.86
-168.9	0.20	0.40	-176.5	0.75	0.88
-169.8	0.25	0.47	-177.0	0.80	0.91
-170.7	0.30	0.54	-177.5	0.85	0.93
-171.5	0.35	0.59	-178.0	0.90	0.96
-172.2	0.40	0.64	-178.5	0.95	0.98
-172.9	0.45	0.68	-178.9	1.00	1.00
-173.6	0.50	0.72			

II-B.2. FIGURAS

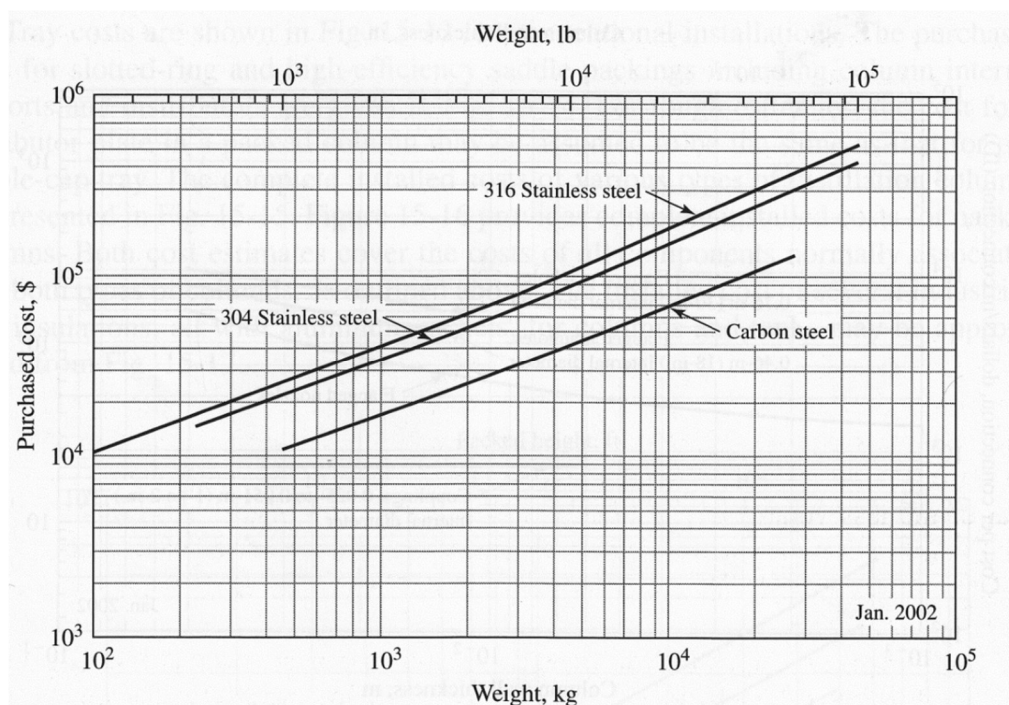


Fig.II-B.1. Coste de torres y columnas según el material utilizado y su peso, en enero del 2002. Los costes son para cuerpo con dos cabezales y soporte, pero sin platos, empaque, o conexiones. (Peters *et al.*, 2003)

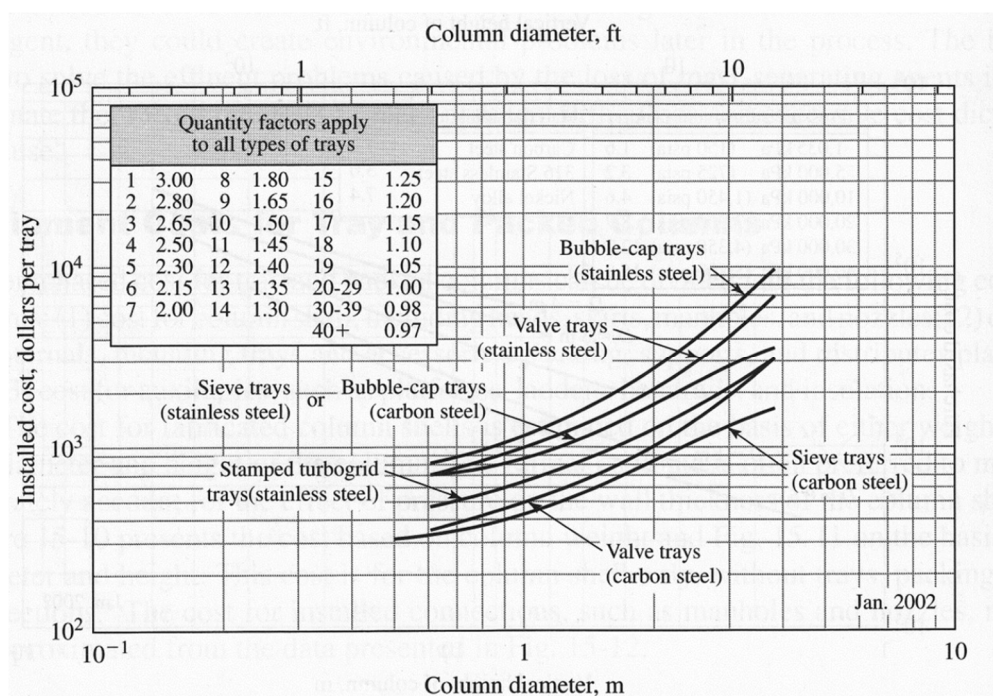


Fig.II-B.2. Coste de distintos platos, según su tipo, el material utilizado y el diámetro de columna, en enero del 2002. (Peters *et al.*, 2003)

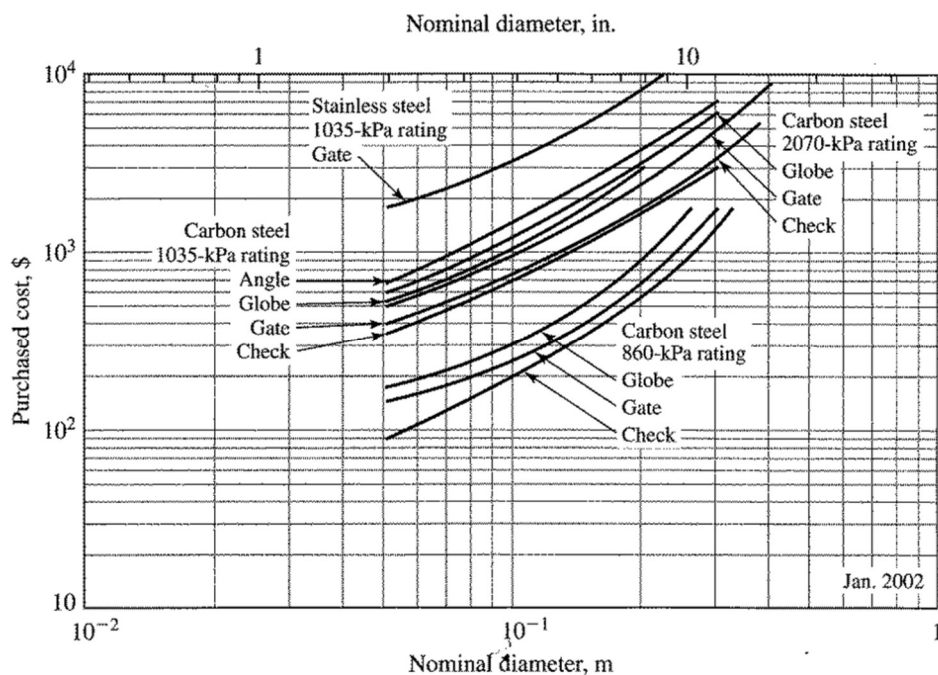


Fig.II-B.3. Coste de válvulas bridas según el tipo de válvula, el material utilizado y el diámetro nominal, en enero del 2002. (Peters *et al.*, 2003)

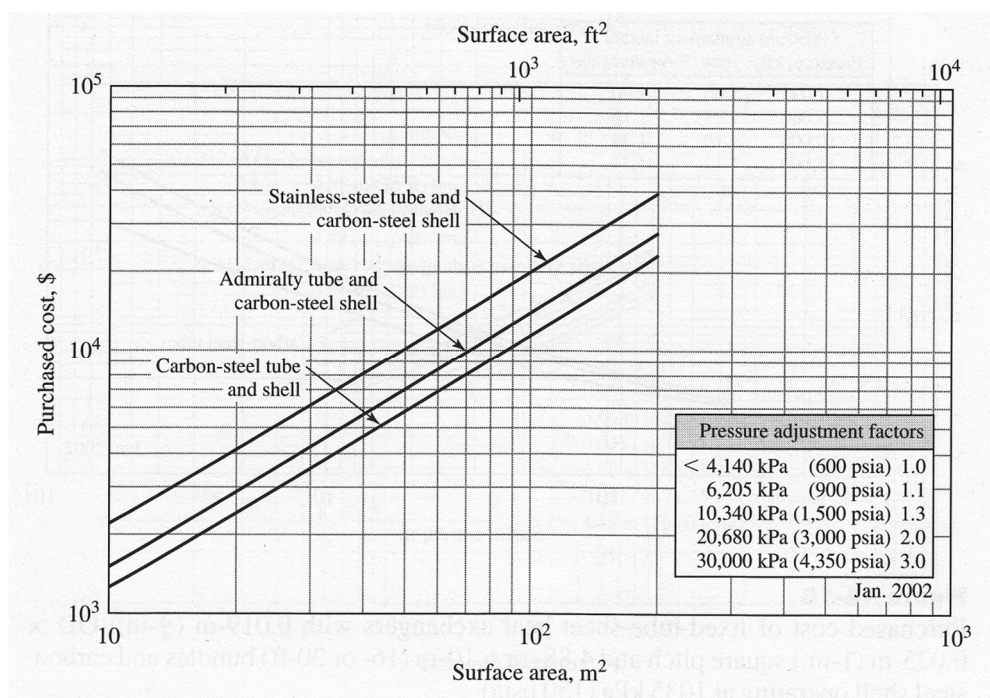


Fig.II-B.4. Coste de intercambiadores de calor de múltiples tubos según el material utilizado y el área de intercambio de calor, en enero de 2002. (Peters *et al.*, 2003)

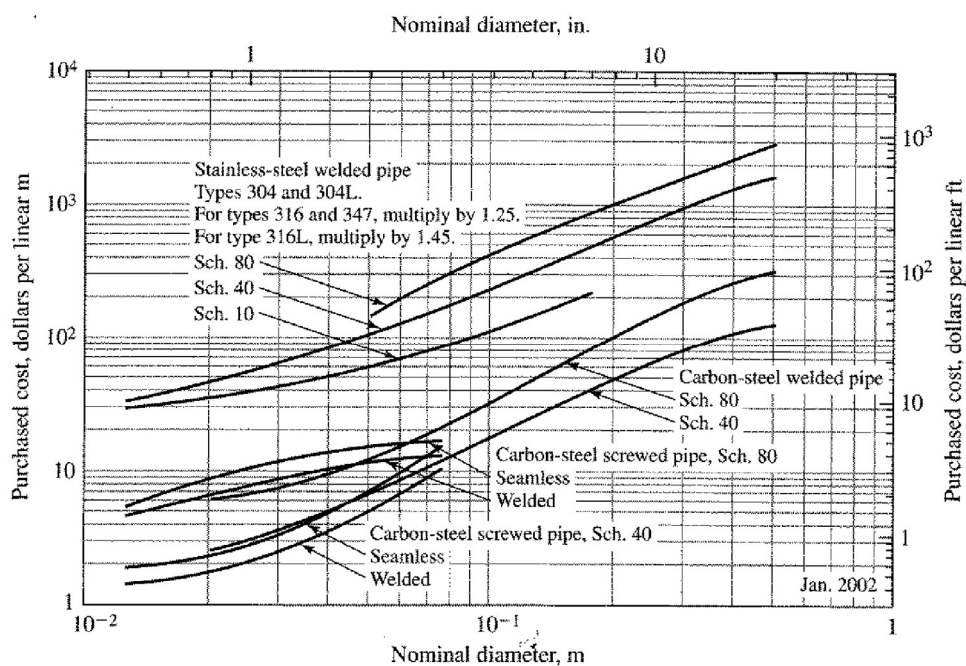


Fig.II-B.5. Coste por unidad de longitud de tuberías atornilladas y soldadas según el material utilizado, el catálogo de tubería y su diámetro nominal, en enero del 2002. (Peters *et al.*, 2003)

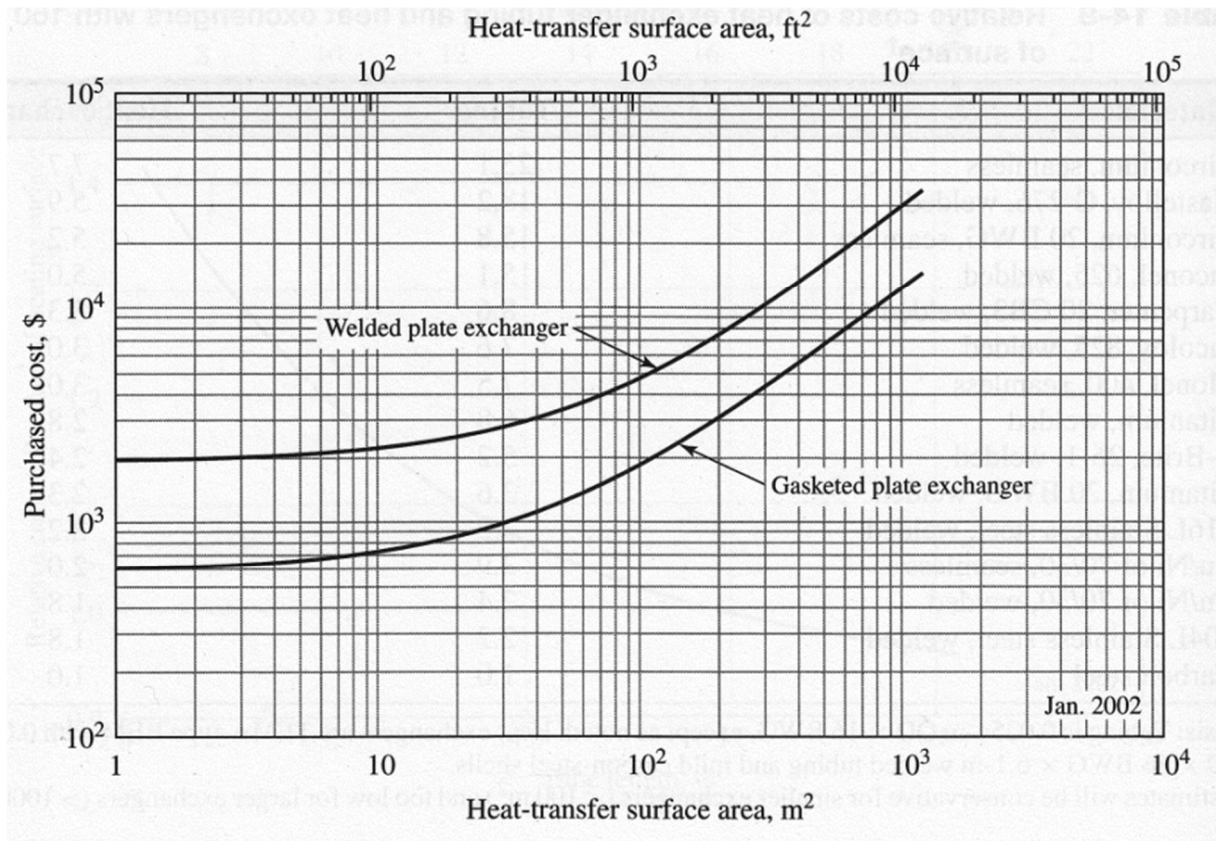


Fig. II-B.6. Coste de intercambiadores de placas soldados y con juntas. (Peters *et al.*, 2003)

APÉNDICE II-C: OTROS CÁLCULOS

II-C.1. CÁLCULO DEL ÁREA DE C-II.1

A continuación, se realizarán los cálculos necesarios para el intercambiador C-II.1. Se considera que la corriente 9 debe enfriarse desde 15 °C hasta -84.8 °C, temperatura con la que entraría a RE-II.1. Se ha optado en este caso por realizar una integración energética local, aprovechando el frío de la corriente 16, que se calentará desde -194.2 °C hasta -100 °C. El calor específico de las corrientes 9 y 16 se obtienen de la base de datos de Aspen Hysys, 1.08 kJ/kg °C y 1.05 kJ/kg °C respectivamente.

$$Q_{C-II.1} = 12\,849 \left(\frac{kg}{h} \right) 1.05 \left(\frac{kJ}{kg\,^{\circ}C} \right) (-100 + 194.2) (^{\circ}C) = 1\,270\,895 \left(\frac{kJ}{h} \right)$$

$$\Delta T = \frac{1\,270\,895 \left(\frac{kJ}{h} \right)}{16\,999 \left(\frac{kg}{h} \right) 1.08 \left(\frac{kJ}{kg\,^{\circ}C} \right)} = 69.2\,^{\circ}C$$

$$\Delta T_{ln} = \frac{(-15.8 + 100) - (-84.8 + 194.2)}{\ln \frac{(-15.8 + 100)}{(-84.8 + 194.2)}} = 96.3\,^{\circ}C$$

Para el cálculo de la U se tomarán los coeficientes de transmisión de calor por convección recomendados en el Peters (2003), que se corresponden con $5\,10^2\,W/m^2\,K$ para la corriente 9 y $2.5\,10^2\,W/m^2\,K$ para la corriente 16. Considerándose despreciable la resistencia por conducción del material:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{2.5\,10^2} + \frac{1}{5\,10^2}} = 166.7 \left(\frac{W}{m^2\,K} \right)$$

De este modo resulta un área de calor de 22 m².

$$A = \frac{1\,270\,895 \left(\frac{kJ}{h} \right) \frac{10^3\,J}{1\,kJ} \frac{1\,h}{3\,600\,s}}{166.7 \left(\frac{W}{m^2\,K} \right) 96.3\,(K)} = 22.0\,m^2$$

II-C.2. CÁLCULO DE LAS NECESIDADES ANUALES DE REFRIGERANTE

Para los servicios necesarios se utilizará amoníaco líquido a presión atmosférica (-33 °C), obtenido en la propia planta, ya que la corriente 9 se debe enfriar desde 15 °C hasta -

15.8 °C, temperatura a la que entraría al cambiador C-II.1. Su entalpía de vaporización se ha obtenido de la base de datos de Aspen Hysys.

$$\text{flujo de amoniaco} = \frac{16\,999 \left(\frac{\text{kg}}{\text{h}}\right) \frac{1\text{ h}}{3\,600\text{ s}} 1.08 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kg } ^\circ\text{C}}\right) (15 + 15.8) ^\circ\text{C}}{4.456 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}\right)} = 35.2 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

Se calcularán las necesidades anuales de amoniaco de la misma forma que en la sección I, resultando un valor de 2 217.6 kg/año.



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

SECCIÓN III: ELÉCTROLISIS DEL AGUA

Por

Marco Andrés Fernández

Oviedo, Julio de 2025

ÍNDICE

III.1. INTRODUCCIÓN	182
III.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	184
III.3. DISEÑO DE LA ELECTRÓLISIS DEL AGUA	187
III.3.1. Descripción de las unidades	188
III.3.1.1. Equipos de filtración F-III.1 y FDC-III.1	188
III.3.1.2. Membranas de ósmosis inversa RO-III.1 y RO-III.2	189
III.3.1.3. Electrodesionizador EDI-III.1	189
III.3.1.4. Electrolizador E-III.1	190
III.3.1.5. Torre de adsorción AD-III.1	190
III.3.2. Estrategias de diseño y resultados obtenidos	191
III.3.2.1. Filtros	191
III.3.2.1.1. Filtro F-III.1	191
III.3.2.1.2. Filtro FDC-III.1	192
III.3.2.2. Membranas de ósmosis inversa RO-III.1 y RO-III.2	193
III.3.2.2.1. Consideraciones previas	193
III.3.2.2.2. Determinación del número de membranas en serie	194
III.3.2.2.3. Cálculo del número de membranas total	198
III.3.2.2.4. Requisitos de limpieza	200
III.3.2.3. Electrodesionizador EDI -III.1	200
III.3.2.4. Electrolizador E-III.1	202
III.3.2.5. Torre de adsorción AD-III.1	205
III.3.2.6. Equipos Auxiliares	208
III.3.2.6.1. Compresores CP-III.1 y CP-III.	208
III.3.2.6.2. Intercambiadores de calor C-II.1 , C-III.2 y C-III.3	211
III.4. DISEÑO MECÁNICO	214

III.4.1. Diseño mecánico de la torre de adsorción AD-III.1	215
III.4.1.1. Presión de diseño	215
III.4.1.2. Grosor del tanque	215
III.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA	218
III.5.1. Equipos	219
III.5.1.1. Filtros de partículas sólidas F-III.1	219
III.5.1.2. Filtros decoloradores FDC-III.1	219
III.5.1.3. Membranas ósmosis inversa RO-III.1 y RO-III.2	219
III.5.1.4. Electrodesionizador EDI-III.1	220
III.5.1.5. Electrolizador E-III.1	220
III.5.1.6. Torre de adsorción AD-III.1	220
III.5.1.7. Compresores CP-1 y CP-2	220
III.5.1.8. Intercambiadores de calor C-III.1, C-III.2 y C-III.3	221
III.5.1.9. Bombas B-III.1, B-III.2, B-III.3, B-III.4 y B-III.5	221
III.5.2. Consumibles	222
III.5.2.1. Vapor Vivo	222
III.5.2.2. Refrigerante	222
III.5.2.3. Electricidad	222
III.5.2.4. Mantenimiento de los lechos	223
III.6. BIBLIOGRAFÍA	224
APÉNDICE III-A: LISTA DE SÍMBOLOS	230
III-A.1. Símbolos latinos	231
III-A.2. Símbolos griegos	232
III-A.3. Abreviaturas	232
III-A.4. Nomenclatura propia del código ASME	233
APÉNDICE III-B: TABLAS Y GRÁFICAS	234
APÉNDICE III-C: CÁLCULOS ADICIONALES	239
III-C.1. Cálculos apartado III.3.2.4.	240
III-C.2. Cálculos apartado III.3.2.5.	240

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla III.I. Balances de materia de la sección III. Corrientes 22 a 30.	186
Tabla III.II. Balances de materia de la sección III. Corrientes 30.2 a 40.	186
Tabla III.III. Descripción de materiales filtrantes aptos para corrientes acuosas (Sutherland, 2008).	191
Tabla III.IV. Caudales y concentración de iones de las diferentes corrientes de entrada y salida al sistema de ósmosis inversa configurado para una única membrana.	196
Tabla III.V. Comparación de los caudales y concentración de iones de las diferentes corrientes de entrada y salida al sistema de ósmosis inversa configurado con dos membranas en serie sin recirculación (caso 1) y con recirculación en la primera (caso 2) y en la segunda membrana (caso 3).	197
Tabla III.VI. Características de la membrana de ósmosis inversa (modelo FilmTec™ BW30HRLE-440) (Ficha técnica membrana BW30HRLE 440, 2025).	198
Tabla III.VII. Comparación del caudal de agua de red, número de membranas y caudal de purga de los casos dos y tres.	199
Tabla III.VIII. Características de las celdas de electrodesionización MK-9 (E-Cell Electrodeionization (EDI) Stack, 2024).	201
Tabla III.IX. Propiedades físicas de la Zeolita 3A (Molecular Sieve 3A from China Manufacturer - Chemxin, 2025).	205
Tabla III.X. Valores de presión y temperatura de la corriente gaseosa en cada compresor.	209
Tabla III.XI. Potencia real calculada para los compresores CP-III.1 y CP-III.2.	210
Tabla III.XII. Valores de U para cambiadores de carcasa y tubo en función de la naturaleza de los fluidos.	213
Tabla III.XIII. Área de transmisión de los cambiadores C-II.1 ,C-III.2 y C-III.3.	213
Tabla III.XIV. Tensiones máximas de trabajo del material de construcción (Peters, Timmerhaus y West, 2003).	216

Tabla III.XV. Datos para el cálculo del grosor de pared la torre.	216
Tabla III.XVI. Costes de los compresores CP-III.1 y CP-III.2.	221
Tabla III.XVII. Coste de los intercambiadores de calor de la Sección III.	221
Tabla III.XVIII. Coste de las bombas de la Sección III.	222
Tabla III.XIX. Consumo eléctrico anual de la Sección III.	223

APÉNDICES

Tabla III-B.I. Propiedades del agua de red empleada en el del proceso (Ayuntamiento de Gijón - Agua, 2025; SINAC - Sistema de Informacion Nacional de Aguas de Consumo 2024; Mobile, 2024).	235
Tabla III-B.II. Propiedades del agua de tipo I y tipo II establecidas por la ASTM.	235
Tabla III-B.III. Cálculos detallados del número de membranas en cada módulo según el caso.	235

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig.III.1. Diagrama de flujo de la sección III.	185
Fig.III.2. Rango de eficacia de distintos métodos de separación (Cescon y Jiang, 2020).	188
Fig.III.3. Esquema del proceso de filtración de membrana osmótica con flujo cruzado (Manual técnico de Membranas RO-FilmTec, 2024).	194
Fig.III.4. Esquema de una membrana de ósmosis inversa.	195
Fig.III.5. Isotermas de adsorción en equilibrio del vapor de agua sobre la zeolita 3A a distintas temperaturas (Ladshaw et al., 2015).	206
Fig.III.6. Selección del tipo de compresor en función del caudal de entrada (m^3/h) y la presión de descarga (bar). CP-III.1 (■), CP-III.2 (●) (Research Gate, 2025).	210

APÉNDICES

Fig III-B.1. Diversos equipos empleados en esta sección: (A) filtro industrial NW800 de la marca Cintropur; (B) filtro automático declorador FDC; (C) membrana FilmTec BW30HRLE-440; (D) celda EDI ; (E) compresor centrífugo ZH series (Potencia máxima 3045 Hp , P_{max} 13 bar y v máximo de 587 m^3/min)	236
Fig III-B.2. Diagrama de flujo la etapa de ósmosis inversa (caso 1)	237
Fig III-B.3. Diagrama de flujo la etapa de ósmosis inversa (caso 2)	237
Fig III-B.4. Diagrama de flujo la etapa de ósmosis inversa (caso 3)	237
Fig III-B.5. Coste de compra de intercambiadores de calor de carcasa y tubos con forma de U. Pinch cuadrado de 0.0254 m OD x 0.0254 m y tubos de 4.88 m que operan a 1035 kPa (Peters, Timmerhaus y West, 2003).	238
Fig III-B.6. Coste de compra de bombas de diafragma, centrífugas y rotativas (Peters, Timmerhaus y West, 2003).	238

III.1.INTRODUCCIÓN

La materia prima de partida para la producción de hidrógeno (H_2) es el agua proveniente de la red doméstica. Principalmente, el agua es de origen superficial y previamente a su distribución se somete a distintos tratamientos físicos y químicos.

La red que abastece la zona en la que se encuentra situada la planta es la Lavandera, en el municipio de Gijón. En la Tabla III-B.I se recogen los valores de los principales parámetros del agua de esta red.

La pureza del agua es un factor limitante en el proceso de electrólisis debido a que impurezas se pueden acumular en los electrolizadores, suponiendo un obstáculo a la transferencia iónica y a las reacciones electroquímicas. Además la presencia de iones de calcio y magnesio puede dar lugar a reacciones secundarias (Zeng y Zhang, 2010).

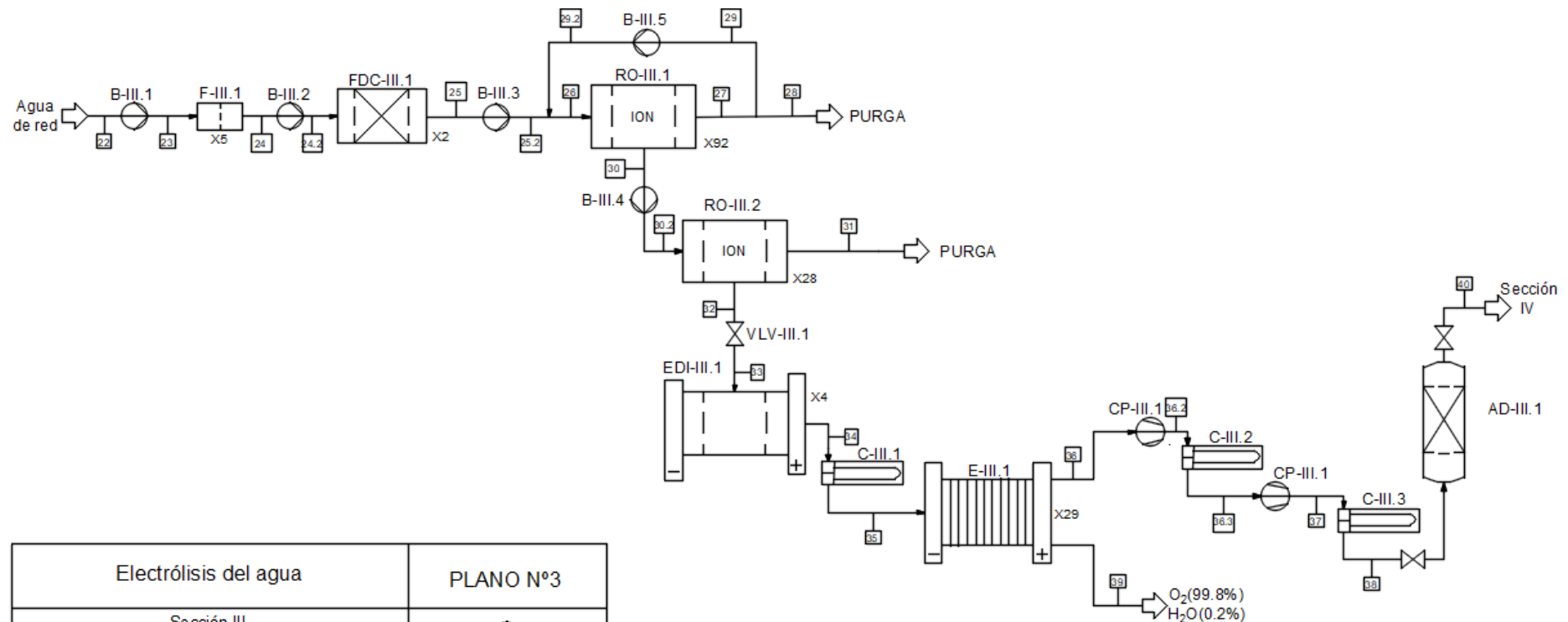
Por lo tanto, en el proceso de electrólisis, el agua de entrada debe ser ultrapura y cumplir con las especificaciones del agua de tipo I establecidas por la ASTM (American Society for Testing and Materials). No obstante, también se puede llegar a emplear un agua de tipo II en el proceso (Simoes et al., 2021). En la Tabla III-B.II se muestran las propiedades del agua de tipo I y tipo II establecidas por la ASTM (Choi, 2024).

Con el objetivo de obtener un agua de estas características será necesario llevar a cabo diversas etapas de pretratamiento del agua. Según la bibliografía consultada, los procesos necesarios para purificar agua proveniente de fuentes superficiales, son la filtración por malla, la coagulación, y la ósmosis inversa (Simoes et al., 2021).

El agua de entrada es agua de red, por lo que ha sido previamente tratada mediante algunos de los citados procesos, incluyendo la filtración por malla y coagulación, por parte de la empresa gestora autorizada. Por lo tanto, en la planta solo será necesario implementar la etapa de ósmosis inversa. En el ámbito industrial, se opta por emplear la ósmosis inversa frente a otras tecnologías como la destilación o el intercambio iónico, gracias a su sencillo mantenimiento, su bajo impacto ambiental y unos costes de operación reducidos. No obstante, antes de la operación con las membranas de ósmosis inversa, se ha decidido incorporar dos etapas adicionales de filtración. La primera de ellas se incluye como medida preventiva para evitar la entrada de sólidos que puedan dañar las membranas y la segunda resulta fundamental para eliminar distintos compuestos presentes en el agua que son corrosivos para las membranas (Cescon y Jiang, 2020).

Finalmente, como no se puede obtener un agua ultrapura empleando únicamente membranas de ósmosis inversa será necesario llevar a cabo una electrodesionización para alcanzar la pureza establecida por la ASTM (Sistemas de agua EDI con electrodesionización - Pure Aqua, Inc., 2025).

III.2.DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA



Electrólisis del agua		PLANO N°3
Sección III		 Universidad de Oviedo
Fecha	Autor	
22/07/2025	Marco Andrés Fernández	

Fig.III.1. Diagrama de flujo de la sección III.

Tabla III.I. Balances de materia de la sección III. Corrientes 22 a 30.

Corriente	22	23	24	24.2	25	25.2	26	27	28	29	29.2	30
Flujo másico (kg/h)												
Agua	148 807	148 807	148 807	148 807	148 807	148 807	767 163	652 088	33 733	618 356	618 356	115 074
Sales	21	21	21	21	21	21	346	342	18	324	324	3
Cloro (x10 ⁻³)	74	74	74	74	1	1	20	19	1	19	19	-
Hidrógeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Oxígeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TOTAL	148 828	148 828	148 828	148 828	148 828	148 828	767 509	652 430	33 751	618 680	618 680	115 077
T (°C)	16	16	16	16	16	16	16	16	16	16	16	16
H (kJ/kg)	67	67	67	67	67	67	67	67	67	67	67	67
P (kPa)	101	1000	980	980	980	980	980	880	880	880	980	880

Tabla III.II. Balances de materia de la sección III. Corrientes 30.2 a 40.

Corriente	30.2	31	32	33	34	35	36	36.2	36.3	37	38	40	39
Flujo másico (kg/h)													
Agua	115 074	80 552	34 522	34 522	33 487	33 487	50	50	50	50	50	-	25
Sales	3	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cloro (x10 ⁻³)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hidrógeno	-	-	-	-	-	-	2 773	2 773	2 773	2 773	2 773	2 773	-
Oxígeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22 006
TOTAL	115 077	80 555	34 522	34 522	33 487	33 487	2 823	2 823	2 823	2 823	2 823	2 773	22 031
T (°C)	16	16	16	16	16	85	100	200	56	123	50	50	100
H (kJ/kg)	67	67	67	67	67	355	1 424	2 858	794	1 758	709	720	92
P (kPa)	880	780	780	690	350	300	300	689	639	1 225	1 175	993	300

III.3.DISEÑO DE LA ELECTRÓLISIS DEL AGUA

III.3.1.DESCRIPCIÓN DE LAS UNIDADES

III.3.1.1.Equipos de filtración F-III.1 y FDC-III.1

Tal y como se indicó en el planteamiento, es necesario incluir dos etapas de filtración con el objetivo de no dañar las membranas de ósmosis inversa.

La unidad de filtración (F-III.1) tiene como objetivo principal eliminar las partículas sólidas en suspensión presentes en el agua de red, mediante una separación física. Para ello, se debe emplear un medio filtrante apropiado que permita el paso del agua mientras los sólidos queden retenidos. En la Figura.III.2, se observa como la filtración es un método de separación muy apropiada que permite separar partículas sólidas de un rango amplio de tamaño, desde los 10 a los 10⁵ μm.

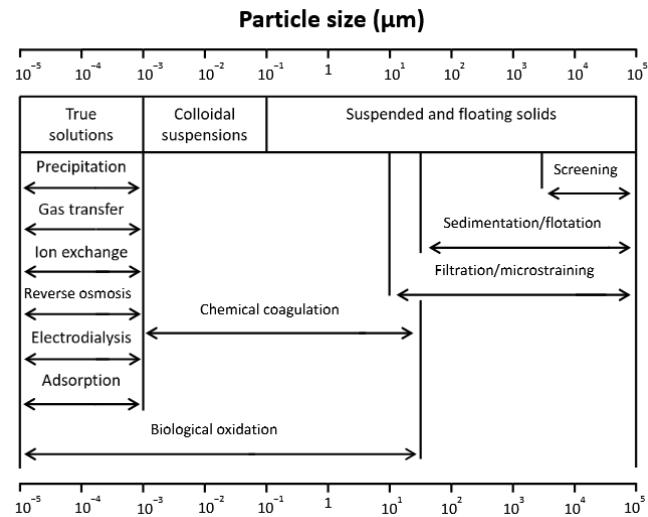


Fig.III.2. Rango de eficacia de distintos métodos de separación (Cescon y Jiang, 2020).

Por otro lado, la segunda unidad (FDC-III.1) tiene como objetivo eliminar el cloro libre (HClO y ClO⁻) del agua de red. La concentración inicial es de 0.5 ppm (Tabla III-B.I) siendo esta la concentración que se utiliza en sistemas de tratamiento de agua para evitar la proliferación de distintos microorganismos.

Sin embargo, las membranas de ósmosis inversa tienen una tolerancia limitada a la exposición al cloro libre y una exposición constante a 0.5 ppm causaría daños en la membrana si no se elimina o se reduce a una concentración de 0.1 ppm (Manual para Membranas RO-FilmTec (extracto), 2022).

III.3.1.2.Membranas de ósmosis inversa RO-III.1 y RO-III.2

Las membranas de ósmosis inversa operan a partir del fenómeno natural de ósmosis donde las moléculas de agua se desplazan espontáneamente de una solución con baja concentración de solutos a una solución con alta concentración de solutos a través de una membrana semipermeable que impide el paso de los solutos, pero no el de las moléculas de agua. El proceso de ósmosis termina cuando se alcanza el estado de equilibrio osmótico donde los potenciales químicos a través de la membrana se igualan. En caso de que la diferencia de presión aplicada sea mayor que la diferencia de presión osmótica a través de la membrana, las moléculas de agua se ven obligadas a fluir en dirección opuesta al del fenómeno de ósmosis directa. Este proceso se denomina ósmosis inversa (RO) (Qasim et al., 2019).

Entre las numerosas aplicaciones de la RO se encuentra la purificación del agua para procesos industriales y la elección frente a otras tecnologías se debe a varias razones técnicas y operativas (Manual técnico de Membranas RO-FilmTec, 2024).

- La RO se encuentra entre los niveles más finos de filtración pudiendo separar partículas de un tamaño de 10^{-5} μm (Figura III.2). De esta manera es capaz de eliminar con eficacias superiores al 95% la mayoría de los iones disueltos en el agua, a diferencia de la filtración convencional que no es capaz de separar iones disueltos.
- A diferencia del intercambio iónico, la RO no requiere de productos químicos regenerantes reduciendo el impacto ambiental y el coste del manejo de residuos del proceso.
- Por último, existe la posibilidad de recircular los flujos de concentrado a la entrada de las membranas, reduciendo de manera considerable el consumo del agua de red del proceso. Además, la corriente de concentrado que no se recircule puede emplearse como fluido refrigerante en lugar de ser purgada, reduciendo los costes de operación del proceso global.

III.3.1.3.Electrodesionizador EDI-III.1

La electrodesionización (EDI) es un proceso continuo que elimina las especies ionizables de los líquidos mediante medios eléctricamente activos, empleando un potencial eléctrico para efectuar el transporte de iones (Alvarado y Chen, 2014).

La celdas EDI se han consolidado como una tecnología de separación iónica clave en la producción de agua ultrapura. Una de las principales razones de su éxito comercial es que sustituyen los productos químicos peligrosos convencionales para regenerar las resinas de intercambio iónico mediante la electricidad. Además, es un sistema de tratamiento que se complementa a la perfección con la ósmosis inversa (Wood et al., 2010; Sistemas de agua EDI con electrodesionización - Pure Aqua, Inc., 2025).

III.3.1.4.Electrolizador E-III.1

Tal y como se mencionó en el apartado 1.3, la tecnología de electrólisis alcalina es la más adecuada para la producción de H_2 de alta pureza en aplicaciones industriales. En este caso el electrolizador diseñado está compuesto por 29 módulos y opera a una presión de 3 bar, con una salida de los gases de 100 °C.

III.3.1.5.Torre de adsorción AD-III.1

La adsorción presenta ventajas significativas frente a otros métodos de separación como la destilación o la absorción química. En primer lugar, cabe destacar su alta eficiencia energética, ya que no requiere cambios de fase ni altas temperaturas durante la operación, lo que reduce considerablemente el consumo energético en comparación con la destilación.

Además, la regeneración de los materiales puede llevarse a cabo mediante una desorción térmica o al vacío, sin la necesidad de emplear reactivos químicos ni generar subproductos, convirtiéndola en una alternativa más sostenible que la absorción química (Ribeiro et al., 2008).

En la mayoría de los casos, las pequeñas partículas del adsorbente se mantienen en un lecho fijo mientras que el fluido pasa continuamente a través del lecho. En algún momento de la adsorción, el sólido se satura, con lo que deja de adsorber soluto, deteniéndose la separación deseada. En ese instante se desvía el flujo hacia un segundo lecho de adsorción y se procede a regenerar el lecho saturado (McCabe, Smith y Harriott, 2007).

De este modo, el sistema implica el uso de al menos dos torres de adsorción trabajando de forma simultánea, mientras una actúa como adsorbedor, la otra es sometida a un proceso de desorción, también conocido como regeneración. El sistema de desorción no se ha diseñado en el presente trabajo.

En la industria, la regeneración de los adsorbentes se realiza normalmente mediante procesos de adsorción por cambio de presión (PSA) o de temperatura (TSA). Para el caso de estudio se ha optado por emplear la PSA ya que es más apropiada para la separación y purificación de gases ligeros como el hidrógeno (Ruthven, 1984). Sin embargo, en el Apartado III.3.2.5. no se ha diseñado esta etapa de desorción, ya que se considera fuera del alcance del proyecto.

III.3.2. ESTRATEGIAS DE DISEÑO Y RESULTADOS OBTENIDOS

III.3.2.1. Filtros

III.3.2.1.1. Filtro F-III.1

Tal y como se menciona en el Apartado III.3.1.1. se ha optado por instalar un filtro previo a la etapa de ósmosis inversa.

Un factor importante en la elección de un filtro es el material de la membrana, ya que se encuentran disponibles una gran variedad de materiales cuya eficacia de separación depende de la naturaleza de la corriente líquida a tratar. Para el caso de estudio, se buscará un material de membrana que sea adecuada para la filtración de agua. A continuación, en la Tabla III.III se muestran las características de dos materiales aptos para el filtrado una corriente acuosa, algodón y nylon.

Tabla III.III. Descripción de materiales filtrantes aptos para corrientes acuosas (Sutherland, 2008).

Material	$T_{\max}$ (°C)	Principal ventaja	Principal desventaja
Algodón	90	Precio	Sujeto al ataque del moho y hongos
Nylon	80	Alta flexibilidad	Absorbe agua

De entre los dos materiales descritos, el algodón dispone de una mayor temperatura máxima ($T_{\max}$) de servicio. Sin embargo, esto no es un factor limitante en este caso concreto, debido a que la filtración es la primera etapa del proceso y la temperatura del agua de red no alcanza los 20 °C. Además, aunque el precio del algodón sea menor, al ser un material más

susceptible al ataque de moho y de hongos, el proceso se encarece debido a la necesidad de un mantenimiento más exhaustivo.

Finalmente, la tela de nylon presenta una alta flexibilidad lo que le aporta una mayor resistencia a la deformación y al daño, así como un menor riesgo de que las partículas del medio se desprendan.

Por los motivos explicados anteriormente, se decide emplear un filtro de membrana de Nylon. Dentro del catálogo de filtros, el que mejor se ajusta a los requisitos de la planta es el NW800 de la marca Cintropur (Ver Figura III-B.1.). Este filtro de uso industrial permite un caudal máximo de 32 m³/h provocando una caída de presión de 0.2 bar. La presión máxima de operación es de 16 bar, aunque el fabricante establece como presión de servicio los 10 bar.

Además, la corriente de agua no debe superar su temperatura máxima de trabajo de 50 °C, tal y como se establece en la ficha técnica proporcionada por el fabricante. Por otro lado, las telas filtrantes son desechables o lavables, en función del material, poliéster o nylon respectivamente, permitiendo que la vida útil del filtro sea mayor (Fichas técnicas Cintropur, 2025)

El caudal de la corriente de agua a tratar es de 148.97 m³/h (148 807 kg/h a 16 °C). Sin embargo, teniendo en cuenta el caudal máximo de cada filtro, la producción se realiza en 5 tramos en paralelo de 29.79 m³/h cada uno.

III.3.2.1.2. Filtro FDC-III.1

Tal y como se señaló en el Apartado III.3.1.1 la eliminación del cloro del agua de red es esencial para poder no perjudicar los equipos de las etapas posteriores. Para llevar a cabo la decloración se ha optado por emplear carbón activado, en particular el derivado de cáscara de coco.

El carbón activo contiene una gran proporción de microporos con el diámetro adecuado para la eliminación de moléculas pequeñas, consiguiendo excelentes resultados en la decloración del agua, eliminación de sabores y olores, así como en la retención de contaminantes orgánicos de bajo peso molecular. El agua de entrada debe estar libre de materia en suspensión, aceites y hierro para alargar la vida útil de los equipos (Ficha técnica filtro automático declorador, 2025).

Este método no requiere la adición de sustancias químicas, y el carbón activo mantiene su efectividad y actividad durante un año por lo que es considerado el método más rentable y respetuoso con el medio ambiente para la decloración, convirtiéndose en la opción ideal para el pretratamiento de la planta (Li et al., 2010).

A modo de ejemplo, los filtros de carbón activo procedente de cáscara de coco son capaces de eliminar con una eficiencia del 99% los compuestos clorados del agua, permitiendo el uso en etapas posteriores de los equipos de ósmosis inversa (Filtros de Carbón Activado Membrom, 2025).

La elección del filtro de carbón activo depende del caudal nominal con el que pueda operar. Esto se debe a que la mayoría de los filtros operan con caudales de agua muy bajos haciendo que su uso a nivel industrial no sea viable. No obstante, en la Figura III-B.1 se muestra un filtro industrial con carbón activo en base de coco que opera con caudales elevados de agua.

La presión máxima del filtro es de 10 bar y la temperatura máxima de operación de 40 °C. Además, el modelo FDC-1625 opera con un caudal nominal de 75.72 m³/h (Ficha técnica filtro automático declorador, 2025). Por lo tanto, para un caudal de agua de entrada 148.97 m³/h de agua de entrada se necesitan 2 sistemas en paralelo compuestos de tres filtros cada uno, que tratan 74.48 m³/h respectivamente.

Por otro lado, el lavado de cada uno de los filtros de cada sistema se realiza a contracorriente con el agua filtrada de los otros dos, evitando bombeos y depósitos adicionales, con la desventaja de que se deja de producir agua durante el lavado. Por lo tanto, para no parar la producción de la planta se decide tener dos sistemas auxiliares

Finalmente, la frecuencia de lavado de estos filtros se debe programar en ciclos de 0,5 a 99 días, según la información proporcionada por el fabricante (Filtro de Carbón Activo, 2025). En este caso, se ha optado por realizar un programa de lavado cada siete días, con el objetivo de mantener la eficiencia del medio filtrante para asegurar la eliminación del cloro .

III.3.2.2.Membranas de ósmosis inversa RO-III.1 y RO-III.2

III.3.2.2.1. Consideraciones previas

En la Figura.III.3 se muestra el esquema del funcionamiento de una membrana de ósmosis inversa. La corriente de alimentación (feed) se separa en dos, el permeado (permeate) que corresponde a la corriente de agua purificada, libre de iones, y el concentrado (concentrate), la corriente de agua concentrada en los distintos iones.

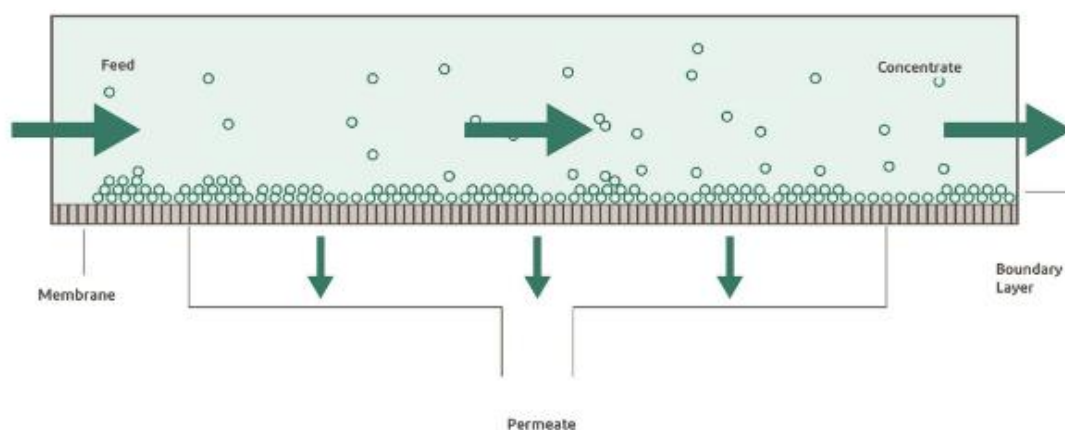


Fig.III.3. Esquema del proceso de filtración de membrana osmótica con flujo cruzado (Manual técnico de Membranas RO-FilmTec, 2024).

A la hora de buscar la membrana más adecuada para el proceso se tendrá en cuenta la capacidad de separar los distintos iones disueltos en el agua y el caudal de operación. Adicionalmente, la membrana debe presentar un alto porcentaje de rechazo a los iones que se encuentran disueltos en el agua de partida.

En este caso, se han seleccionado las membranas de la gama FilmTec™ (ver Figura III-B.1.), que tienen un porcentaje de recuperación de agua del 15% y presentan porcentajes de rechazo del 99% para una amplia lista de sales formadas por iones presentes en el agua de red. Para el caso de estudio se ha seleccionado el modelo BW30HRLE-440, ya que ofrece una buena separación con un bajo consumo energético y una caída de presión de 1 bar por membrana. Además, operan en un gran intervalo de pH bajo unas condiciones de presión (41 bar) y temperatura (45 °C) mayores que las requeridas en el proceso, 9.8 bar y 16 °C (Ficha técnica membrana BW30HRLE 440, 2025).

III.3.2.2.2. Determinación del número de membranas en serie

El objetivo del sistema de membranas es obtener una corriente de agua de 34.56 m³/h (34 522 kg/h a 16 °C) con una dureza de 1 ppm, que corresponde al valor máximo con el que puede operar el electrodesionizador.

En la Figura.III.4 se muestra un esquema general de la membrana, sobre el que se realizarán los balances de materia.

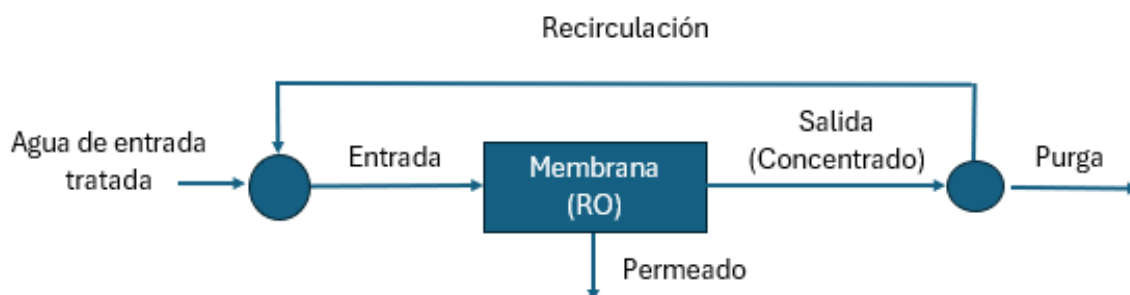


Fig.III.4. Esquema de una membrana de ósmosis inversa.

A la hora de realizar los balances de materia se tiene en cuenta las siguientes consideraciones:

1. La recuperación de agua en el permeado es de un 15% si se emplea una única membrana. En el caso de que se empleen dos o más membranas en serie la recuperación es del 30% a partir de la segunda membrana (Manual técnico de Membranas RO-FilmTec, 2024).
2. Para reducir el consumo de agua de clorada se lleva a cabo una recirculación de la corriente de concentrado a la entrada de la membrana. Además, se añade una purga para mantener fija la concentración de iones a la entrada.
3. La eficacia de separación de iones es del 99% (Estimated Percent Rejection of Various Solutes by FILMTEC™ Membranes, 2019).
4. La concentración máxima de iones en la corriente de entrada es de 2 000 ppm (Manual técnico de Membranas RO-FilmTec, 2024).
5. La concentración en iones de la corriente de salida es la misma que en las corrientes de purga y recirculación.

A partir de las consideraciones anteriores se procede a realizar los balances de materia de cada corriente, empleando una única membrana. En la Tabla III.IV. se muestran los caudales volumétricos (v) y concentración de sales (C) de cada corriente.

Tabla III.IV. Caudales y concentración de iones de las diferentes corrientes de entrada y salida al sistema de ósmosis inversa configurado para una única membrana.

	Agua de entrada tratada	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
V (m ³ /h)	-	230.40	195.87	-	-	34.56
C (ppm)	142.00	15.00	17.47	17.47	17.47	1

En la Tabla III.IV se observa que, para obtener una corriente de permeado con una dureza de 1 ppm, la corriente de entrada a la membrana debe presentar una concentración máxima de 15 ppm. Sin embargo, no se puede alcanzar dicha concentración utilizando agua de red, ni mediante la recirculación parcial del concentrado, ya que ambas corrientes presentan durezas mayores a 15 ppm.

De este modo, al no ser posible la operación con una única membrana se procede a estudiar distintas configuraciones formadas por dos membranas en serie. En la Tabla III.V, se muestran los resultados para una configuración de dos membranas en serie sin la recirculación de las corrientes de concentrado y dos configuraciones de dos membranas con recirculación parcial de las corrientes de concentrado. En las Figuras III-B.2, III-B.3 y III-B.4 del Apéndice III-B, se muestra un diagrama de flujo de la configuración de cada uno de los casos.

De los resultados de la Tabla III.V se observa que al operar con dos membranas en serie es posible obtener un permeado con una dureza inferior a 1 ppm. No obstante, la configuración sin llevar a cabo la recirculación parcial del concentrado requiere de caudales de agua de red elevados. (Para el cálculo de los flujos máxicos de las corrientes 22-34 de las Tablas III.I y III.II, se ha tomado como valor de la densidad, el del agua a 16 °C, 998.91 kg/m³).

Por eso es lógico que al implementar la recirculación parcial de la corriente de concentrado a la entrada de la membrana se reduce el consumo del agua de entrada. De este modo, con el objetivo de optimizar el consumo de agua, en los siguientes subapartados, se procede a comparar las configuraciones de los casos 2 y 3.

Tabla III.V. Comparación de los caudales y concentración de iones de las diferentes corrientes de entrada y salida al sistema de ósmosis inversa configurado con dos membranas en serie sin recirculación (caso 1) y con recirculación en la primera (caso 2) y en la segunda membrana (caso 3).

Caso 1: Dos membranas en serie sin recirculación						
Membrana 1						
	Agua de entrada	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
v (m ³ /h)	768.00	768.00	652.8	0.00	0.00	115.20
C (ppm)	142.00	142.00	165.39	0.00	0.00	9.47
Membrana 2						
	Permeado 1	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
v (m ³ /h)	115.20	115.20	80.64	0.00	0.00	34.56
C (ppm)	9.47	9.47	13.39	0.00	0.00	0.32
Caso 2: Dos membranas en serie con recirculación en la primera membrana.						
Membrana 1						
	Agua de entrada	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
v (m ³ /h)	148.97	768.00	652.80	619.03	33.77	115.10
C (ppm)	142.00	450.00	524.12	524.12	524.12	30.00
Membrana 2						
	Permeado 1	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
v (m ³ /h)	115.10	115.1	80.64	0.00	0.00	34.53
C (ppm)	30.00	30.00	42.43	0.00	0.00	1.00
Caso 3: Dos membranas en serie con recirculación en la segunda membrana.						
Membrana 1						
	Agua de entrada	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
v (m ³ /h)	289.38	289.38	245.97	0.00	0.00	43.41
C (ppm)	142.00	142.00	165.45	0.00	0.00	9.47
Membrana 2						
	Permeado 1	Entrada	Concentrado	Recirculación	Purga	Permeado
v (m ³ /h)	43.41	115.20	80.57	71.69	8.90	34.56
C (ppm)	9.47	30.00	42.43	42.43	42.43	1.00

III.3.2.2.3. Cálculo del número de membranas total

Una vez calculados los caudales de cada corriente se procede a determinar el número de membranas necesarias para llevar a cabo la separación deseada teniendo en cuenta que la operación se realiza en dos módulos compuestos por un número de membranas diferente.

En la Tabla III.VI se muestran las características de la membrana para llevar a cabo dichos cálculos (Ficha técnica membrana BW30HRLE 440, 2025).

Tabla III.VI. Características de la membrana de ósmosis inversa (modelo FilmTec™ BW30HRLE-440) (Ficha técnica membrana BW30HRLE 440, 2025).

Producto	Área activa (m ²)	Caudal máximo (m ³ /h)	Caudal de permeado (m ³ /h)
FilmTecTMBW30HRLE-440	41	15.00	1.26

A partir de los datos de la Tabla III.VI se procede a calcular el flujo específico de la membrana (J) a partir del caudal de permeado generado (v_{pm}) y el área activa (A_m) empleando la Ecuación III.1 .

$$J = \frac{v_{pm}}{A_m} = \frac{1.26 \text{ m}^3/\text{h}}{41 \text{ m}^2} = 0.03 \text{ m}^3/(\text{m}^2 \text{ h}) \quad [\text{III.1}]$$

Mediante la Ecuación III.2 se calcula el área total de membrana (A_{mod}) necesaria para cada módulo, a partir del valor de J anterior y del caudal total de permeado (v_{pmod}) del módulo (Tabla III.VII)

$$A_{mod} = \frac{v_{pmod}}{J} \quad [\text{III.2}]$$

Finalmente, se calcula el número de membranas necesarias para cada módulo a partir de A_{mod} y A_m a partir de la Ecuación III.3.

$$N_m = \frac{A_{mod}}{A_m} \quad [\text{III.3}]$$

En la Tabla III.VII se presenta a modo de resumen, los resultados obtenidos en los dos casos de estudio, cuyos cálculos detallados se muestran en la Tabla III-B.III del Apéndice III-B.

Tabla III.VII. Comparación del caudal de agua de red, número de membranas y caudal de purga de los casos dos y tres.

	Caso 2				Caso 3			
	$V_{\text{agua de red}}$ (m ³ /h)	N_m	V_{purga} (m ³ /h)	C (ppm)	$V_{\text{agua de red}}$ (m ³ /h)	N_m	V_{purga} (m ³ /h)	C (ppm)
Módulo 1	-	92	33.77	524.12	-	35	245.97	165.45
Módulo 2	-	28	80.64	42.43	-	28	8.90	42.43
Total	148.97	120	114.41	-	289.63	63	254.87	-

A partir de los resultados de la Tabla III.VII, se observa que el caso 2 requiere un consumo de agua de red inferior al caso 3, lo que representa una ventaja significativa en términos de sostenibilidad y de costes operativos.

Además, el hecho de consumir una menor cantidad de agua de red ($V_{\text{agua de red}}$) conlleva a que el caudal total de purga generado (V_{purga}) en el caso 2 sea claramente inferior al caso 3, lo que implica menores pérdidas de agua y menores costes asociados a la gestión de efluentes.

Un factor adicional para tener en cuenta es la dureza de las corrientes de purga. En el caso 2, se generan 114.41 m³/h de purga de los cuales, 80.64 m³/h presentan una dureza baja (42.43 ppm). Sin embargo, en el caso 3, la mayor parte de la purga total tiene una dureza alta (165.45 ppm) lo que limita su reutilización como refrigerante sin un tratamiento previo porque puede provocar incrustaciones y ensuciamientos en los equipos de intercambio térmico, afectando negativamente a su eficiencia y vida útil.

Aunque el diseño correspondiente al caso 2 requiera un mayor número de membranas, este incremento en los costes de inversión se ve compensado por los beneficios medioambientales y operativos mencionados previamente. Por otro lado, si bien el caso 3 requiere de un número de membranas menor, la necesidad de un caudal de agua de entrada mayor implicaría incorporar más equipos en las etapas previas de filtración.

Finalmente, teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, se considera al caso 2 como la opción más adecuada para la planta.

III.3.2.2.4. Requisitos de limpieza

Las membranas de los elementos de ósmosis inversa pueden llegar a ensuciarse con partículas coloidales, componentes orgánicos insolubles, minerales etc. Estos depósitos se acumulan en las superficies de la membrana durante su funcionamiento provocando una pérdida del caudal normalizado de permeado e incluso una pérdida del rechazo de algunas sales. Por lo tanto, la limpieza de las membranas es un aspecto clave para mantener el funcionamiento efectivo del proceso.

En el manual de manejo de este tipo de membranas, facilitado por el proveedor, (Manual técnico de Membranas RO-FilmTec, 2024) se muestran los parámetros que indican la necesidad de limpiar o cambiar la membra.

- El caudal de permeado disminuye un 10%.
- El paso de sal normalizado aumenta un 5 - 10%.
- La caída de presión normalizada (diferencia entre la presión de alimentación y la presión de concentrado) aumenta un 10 - 15% .

Es importante tener en cuenta que, si la limpieza se demora, es posible que no se pueda reestablecer satisfactoriamente el rendimiento de la membrana. Por eso, en base a estos datos y a las recomendaciones del fabricante, se puede prever que es necesario limpiar o cambiar la membrana cada seis meses. Sin embargo, se revisará mensualmente los parámetros anteriores para anticipar el ensuciamiento.

III.3.2.3.Electrodesionizador EDI -III.1

La corriente de agua obtenida de la etapa de ósmosis inversa es de 34.56 m³/h con una dureza de 1 ppm, a 16 °C y 3 bar . Esta dureza es lo suficientemente baja como para poder someterse a un proceso de electrodesionización, sin perjuicio del equipamiento del mismo, con la finalidad de obtener el agua ultrapura.

En la Figura III-B.1 se muestra una fotografía de una celda EDI empleada a nivel industrial para distintas aplicaciones, entre ellas obtener agua ultrapura.

Posteriormente, en la Tabla III.VIII se muestran sus especificaciones técnicas correspondientes como el valor máximo de presión a la entrada 6.9 bar (690 kPa). La corriente 32 que proviene de las de las membranas de RO se encuentra a 7.8 bar (780 kPa) por lo que se instala una válvula de expansión (VLV-III.1) para reducir la presión de la corriente a los 6.9 bar y cumplir con los requerimientos técnicos de las celdas.

Tabla III.VIII. Características de las celdas de electrodesionización MK-9 (E-Cell Electrodeionization (EDI) Stack, 2024).

	Parámetro	Valor cuantificado
Propiedades corriente de entrada	Temperatura (°C)	4.4-40
	Dureza (ppm CaCO ₃)	<1
	Resistividad (MΩ-cm)	<16
Propiedades producto	Caudal de producto (m ³ /h)	6.0-10.0
	Recuperación de agua (%)	97
Parámetros de operación	Voltaje (VDC)	0-400
	Amperaje (ADC)	0-5.2
	Presión de entrada (bar)	4.1-6.9
	ΔP (bar)	2.4-3.4

A partir del caudal de permeado (v_p) obtenido en el Apartado 3.2.2, se calcula el caudal de agua ultrapura ($v_{agua\ ultrapura}$) producida a partir de la Ecuación III.4, teniendo en cuenta una recuperación del agua (R_{agua}) por parte del sistema EDI del 97%.

$$v_{agua\ ultrapura} = v_p \cdot R_{agua} = 34.56 \frac{m^3}{h} 0.97 = 33.52 \frac{m^3}{h} \quad [III.4]$$

Para producir 33.52 m³/h (33 487 kg/h a 16 °C) de agua ultrapura se necesita operar con 4 equipos en paralelo con un valor medio de producción de 8.38 m³/h por equipo, para mantener una producción inferior al valor máximo del equipo (10 m³/h).

Además, se observa que la temperatura (16 °C) y la presión (6.9 bar) de la corriente de entrada (33) están dentro del rango de operación del equipo. Teniendo en cuenta la caída de presión del equipo de 3.4 bar, la corriente de salida (34) tiene una presión de 3.5 bar.

La potencia eléctrica del equipo (P_e) se calcula con la Ecuación III.5 a partir del voltaje (V), la intensidad de corriente (I) y el número de equipos totales (N).

$$P_e = V I N \quad [III.5]$$

En el caso de 4 celdas EDI del modelo MK-9, con un voltaje de 400 V y una intensidad de corriente de 5.2 A (Tabla III.VIII) , la potencia eléctrica total del sistema es de 8.32 kW.

III.3.2.4. Electrolizador E-III.1

Una vez obtenida el agua ultrapura, la corriente 35 se somete a un proceso de electrólisis con la finalidad de obtener H_2 verde, una de las materias primas para la obtención del producto final.

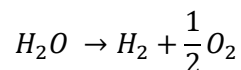
A la hora de realizar los cálculos, se tiene en cuenta que aproximadamente un 10% del agua de la corriente 35 se pierde durante el proceso de electrólisis. Además siguiendo las recomendaciones de la bibliografía se ha considerado un 16 % adicional para la limpieza de distintos equipos del proceso (Simoes et al., 2021).

El diseño del electrolizador pasa por determinar el número de módulos necesarios para llevar a cabo la producción de hidrógeno a partir de la corriente 35 considerando las pérdidas anteriores (1 379.62 kmol/h, 24 853.41 kg/h) considerando las pérdidas anteriores. A partir del número de módulos se calculará la potencia necesaria de todo el sistema de electrólisis y posteriormente su coste.

Los electrolizadores alcalinos comerciales operan en un rango de temperatura de 65-100 °C y un rango de presiones de 2 -10 bar (Chang y Rajuli, 2024). En este caso, se asume que la presión de la corriente se mantiene constante respecto a la etapa anterior, a 3 bar, y la temperatura aumenta hasta los 100 °C.

Una de las características de la electrólisis alcalina es la necesidad de emplear un electrolito para mejorar la conductividad eléctrica del medio. En este caso se ha optado por una disolución de KOH al 30% (masa) ya que es capaz de proveer mayor conductividad que el resto de electrolitos en las mismas condiciones de temperatura y concentración (Hu et al., 2022).

La reacción de electrólisis presenta la siguiente estequiometría:



Las corrientes de salida (36 y 39) del electrolizador tienen una pureza del 99.8% (moles) de H_2 y O_2 respectivamente (Chang y Rajuli, 2024). De acuerdo con la estequiometría de la reacción un 0.02% del agua ultrapura (2.8 kmol/h) no reacciona y se arrastra con el H_2 de la corriente 36. Por otro lado, un 0.01% (1.4 kmol/h) tampoco reacciona y se arrastra con el O_2 de la corriente 39 .

De este modo, dado que la cantidad de agua reaccionante es de 1 375.5 kmol/h se producen 1 375.5 y 687.74 kmol/h de H_2 y O_2 respectivamente. A partir de la Ecuación III.6

(Rizwan, Alstad y Jäschke, 2021) se obtiene el número de celdas electrolíticas (n_c) para llevar a cabo dicha producción.

$$\tilde{N}_{H_2}^{gen} = \eta_F \frac{n_c I_k}{zF} \quad [III.6]$$

Donde:

$\tilde{N}_{H_2}^{gen}$: Flujo molar de H_2 generado (1 375.5 kmol/h , 382.1 mol/s)

η_F : Eficiencia de Faraday (u.f)

n_c : Número de celdas

I_k : Corriente eléctrica de la celda

z : Número de electrones intercambiados por mol de especie generada, 2 (H_2)

F : Constante de Faraday, 96 485 C/mol

Los valores de I_k y η_F se calculan empleando las Ecuaciones III.7 y III.8.

$$I_K = i A \quad [III.7]$$

$$\eta_F = \frac{\left(\frac{I_k}{A_e}\right)^2}{f_1 + \left(\frac{I_k}{A_e}\right)^2} f_2 \quad [III.8]$$

Donde:

i : Densidad de corriente (A/cm^2)

A_e : Área activa de electrodo (m^2)

f_1 : Parámetro de ajuste experimental uno (mA^2/cm^4)

f_2 : Parámetro de ajuste experimental dos (u.f)

Los valores de A_e e i se han obtenido de la bibliografía para la electrólisis alcalina (AWE), siendo el valor de A_e de $3 m^2$ y para el caso de i se ha tomado un valor de $0.4 (A/cm^2)$ (Hou y Yang, 2024).

En el caso de los parámetros f_1 y f_2 , se deben obtener de manera experimental. Sin embargo, como no existe la posibilidad de realizar los experimentos pertinentes se han tomado valores medios procedentes de la bibliografía (Rizwan, Alstad y Jäschke, 2021). En este caso, f_1 es $140 mA^2/cm^4$ y de f_2 0.97.

A partir de las ecuaciones anteriores, se calculan los valores de I_K , 12 000 A y η_F , 0.969 para obtener el número de celdas total del sistema de electrólisis, en este caso 6 340. (Apartado III-C.1 del Apéndice III-C).

Los electrolizadores a nivel industrial están formados por varios módulos donde tiene lugar el proceso de electrólisis. Por lo tanto, es necesario calcular el número de celdas del total que formarán parte de cada módulo ($n_{c,stack}$) a partir de la ecuación III.9.

$$n_{c,stack} = \frac{V_T}{V_k} \quad [III.9]$$

El cálculo del potencial de cada módulo (V_k) es un proceso laborioso, que no se ha considerado dentro del alcance de este proyecto. Dado que los valores de f_1 y f_2 se han obtenido de la bibliografía, se ha optado por hacer lo mismo con V_k , considerándose un valor de 1.8 V (Hu et al., 2022).

La tensión máxima total de instalaciones trifásicas (V_T) en España es de 400 V (TotalEnergies, 2025). Por lo tanto, teniendo en cuenta los valores anteriores, se obtiene un valor de 223 celdas por cada módulo.

Finalmente, el número de módulos necesarios (n_{stack}) para el proceso de electrólisis se calcula con la Ecuación III.10 .

$$n_{stack} = \frac{n_c}{n_{c,stack}} = \frac{6\,340}{223} = 29 \text{ módulos} \quad [III.10]$$

Para calcular la potencia del sistema de electrólisis se debe obtener el caudal volumétrico de H_2 producido en condiciones normales (1 atm y 273 K) (Nv_{H_2}). Para realizar el cálculo se considera un valor medio de la temperatura y de la presión de la corriente a lo largo de la operación 365.5 K (92.5 °C) y 3 atm (3 bar) respectivamente.

En los cálculos realizados (sección III-C.1 del Apéndice III-C), se obtiene un valor de Nv_{H_2} de 30 792 Nm³/h. La potencia del sistema de electrólisis (P_{AWE}) se calcula mediante la Ecuación III.11 a partir de Nv_{H_2} y el consumo de energía eléctrica de un electrolizador alcalino (E_{AWE}) cuyo valor se ha obtenido de la bibliografía, 4.6 kWh/Nm³ (Hou y Yang, 2024).

$$P_{AWE} = Nv_{H_2} E_{AWE} = 4.6 \frac{kWh}{Nm^3} \cdot 30790 \frac{Nm^3}{h} = 141\,634 \text{ kW} \quad [III.11]$$

III.3.2.5.Torre de adsorción AD-III.1

La corriente de H_2 (38) contiene trazas de agua que deben eliminarse mediante un sistema de adsorción con zeolita. El objetivo principal del diseño de esta etapa es determinar la masa de adsorbente y las dimensiones del lecho para llevar a cabo la separación.

En este caso, se ha optado por emplear una zeolita 3A. Entre todas las variedades de zeolita, la 3A es un adsorbente ideal para eliminar exclusivamente agua de una corriente gaseosa gracias a su tamaño de poro efectivo de 3 Å (0,3 nm) (Material de adsorción y tamices moleculares | Compresores BERG, 2025). Aunque el H_2 tiene un tamaño lo suficientemente pequeño como para entrar en estos poros, el hecho de que esta zeolita tenga una alta polaridad impide que el H_2 , de naturaleza no polar, se adsorba en los poros de manera efectiva, mientras que las moléculas de agua sí quedan retenidas. Las principales características de esta zeolita se muestran en la Tabla III.IX.

Tabla III.IX. Propiedades físicas de la Zeolita 3A (Molecular Sieve 3A from China Manufacturer - Chemxin, 2025).

ZEOLITA 3A	
D_{poro} (nm)	0.3
$D_{\text{partícula}}$ (mm)	2.1
Esfericidad	1
Densidad (kg/m^3)	700
Carga Adsorbato Equilibrio (kg agua/kg Zeolita)	0.21
Contenido en agua (kg agua/kg Zeolita)	0.015

Las condiciones de presión y temperatura afectan a la capacidad adsorbente de la zeolita. En la Figura III.5 se muestran las isotermas de adsorción del vapor de agua sobre la zeolita 3A y se observa que se ve favorecida a temperaturas bajas y a presiones altas. Sin embargo, operar a temperaturas extremadamente bajas requiere un mayor gasto energético para la regeneración del lecho. Por otro lado, la capacidad máxima de adsorción se alcanza en torno a 1 bar (100kPa) por lo que trabajar a mayores presiones no aumenta en gran medida la capacidad de adsorción de la zeolita, pero permite reducir el tamaño de la torre de adsorción por el aumento de la densidad del gas.

Teniendo en cuenta estos factores se ha optado por llevar a cabo la separación a 50 °C y 11.7 bar. De los balances de materia se obtiene que la corriente a tratar (38) contiene 49.62 kg/h de agua (2.76 kmol/h) y 2 772.57 kg/h (1 375.5 kmol/h) de hidrógeno.

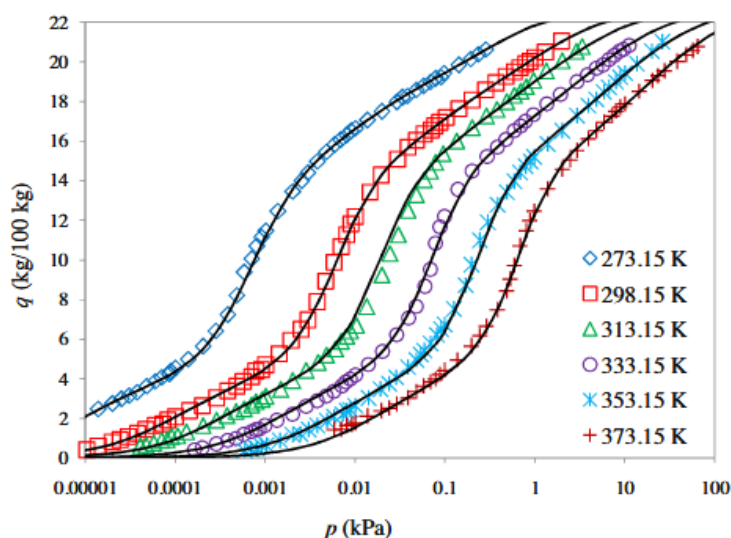


Fig.III.5. Isotermas de adsorción en equilibrio del vapor de agua sobre la zeolita 3A a distintas temperaturas (Ladshaw et al., 2015).

Para asegurar una operación de adsorción eficiente, es importante que la fracción de agua no se encuentre en estado líquido. La solubilidad del agua en hidrógeno es de 0.0149 (mol H₂O/mol totales) a 12 bar y 50 °C (Rahbari et al., 2019) por lo que todo el agua de la corriente 38 se encuentra en fase vapor debido a que la fracción molar de agua (y_{H_2O}) es 0.002.

Diversos estudios experimentales establecen que operar hasta la saturación completa del lecho no es eficiente en términos energéticos. Además, previamente a la saturación del lecho tiene lugar su ruptura donde la concentración de adsorbato a la salida del adsorbador aumenta progresivamente por lo que siguiendo las recomendaciones de los datos bibliográficos se decide trabajar hasta alcanzar una saturación del lecho del 70% (Xia et al., 2022). La masa de Zeolita 3A necesaria para un tiempo de ciclo supuesto de 8 horas, se calcula a partir de la Ecuación III.12 y los datos de la Tabla III.IX.

$$\text{Masa Zeolita 3A} = \frac{m t_c}{\theta W_{eq}} = \frac{49.62 \frac{\text{kg}}{\text{h}} 8 \text{ h}}{0.7 0.21} = 2702 \text{ kg} \quad [\text{III.12}]$$

Donde:

θ : saturación del lecho

W_{eq} : carga de adsorbato en equilibrio (kg/kg)

m : flujo másico de agua (kg/s)

t_c : tiempo de ciclo (h)

De acuerdo con la recomendación de las reglas heurísticas de la ingeniería química, (Walas, 1998), se decide operar con un exceso del 10%, resultando una masa de zeolita de 2 973 kg. Finalmente, el volumen ocupado por un lecho de 2 973 kg y una densidad del lecho (ρ_b) de 700 kg/m³ (Tabla III.IX) es de 4.24 m³.

Una vez calculado el volumen ocupado por la zeolita, es necesario considerar la porosidad del lecho para estimar el volumen total requerido (Ecuación III.13). Según la bibliografía consultada (McCabe, Smith y Harriott, 2007) el valor de la porosidad (ε) de lechos donde el relleno sea esférico y el diámetro de partícula sea muy inferior al diámetro del tanque es de 0.34.

$$1 - \varepsilon = \frac{V_{zeolita\ 3A}}{V_{Total}}, V_{Total} = \frac{V_{zeolita\ 3A}}{1 - \varepsilon}, V_{Total} = \frac{4.24\ m^3}{1 - 0.34} = 6.43\ m^3 \quad [III.13]$$

A partir del volumen obtenido y de la relación L/D se calcula el diámetro y la longitud del lecho. En la industria se suele emplear valores de L/D comprendidos entre 2 y 5. Para el diseño de este equipo se ha optado por un valor de 2. Al despejar el diámetro (D) de la ecuación del volumen de un cilindro ($\pi D^2 L/4$), se obtiene un valor de 1.60 m siendo la longitud 2 veces mayor, 3.20 m.

Una vez determinado el volumen de lecho y sus dimensiones geométricas (diámetro y longitud) se procede a calcular la caída de presión asociada al paso de la corriente gaseosa a través del lecho mediante la Ecuación de Ergun (Ecuación I.13) a partir de los datos del Apéndice III-C.2.

$$\frac{\Delta p_b}{L} = \frac{u\ 150\ \mu\ (1 - \varepsilon)^2}{(D_p^2\ \varepsilon^3)} + \frac{1.75\ \rho\ u_0^2\ (1 - \varepsilon)}{(D_p\ \varepsilon^3)} = 56.8\ \frac{kPa}{m} \quad [I.13]$$

La caída de presión de una torre de 3.2 m de longitud sería de 182 kPa siendo un valor inferior al límite en torres de adsorción PSA, 200 kPa (Ruthven, 1994). De este modo la corriente de salida de la torre de adsorción tiene un caudal de 2 772.57 kg/h y una presión de 993 kPa. Por último, se calcula el tiempo de saturación del lecho mediante la Ecuación I 1.14

$$t^* = \frac{L\rho_b(W_{sat} - W_0)}{c_0 \cdot u} = \frac{3.20\ m \cdot 700\ \frac{kg}{m^3} \cdot (0.21 - 0.015)\ \frac{kg}{kg}}{0.001\ \frac{kg}{m^3} \cdot 6.00\ \frac{m}{s} \cdot \frac{3600\ s}{1\ h}} = 20.22\ h \quad [I.14]$$

El tiempo de saturación del lecho resulta mayor que el tiempo de ciclo seleccionado para la operación garantizando así una separación completa del agua, ya que entre el inicio del punto de ruptura y saturación total del lecho, la separación es del 99% (McCabe, Smith y Harriott, 2007).

Por lo tanto, interrumpir la adsorción antes de alcanzar la saturación asegura que la fracción separada del agua sea del 100%.

La operación de adsorción consta de dos lechos que trabajan de forma simultánea, de modo que mientras en uno se realiza la adsorción de agua, en el otro se regenera la zeolita; de este modo, no es necesario parar la producción mientras se regenera el lecho empleado.

La regeneración del lecho PSA permite la desorción rápida del agua sin necesidad de calentamiento. Los tiempos de ciclo de regeneración suelen durar minutos así que un tiempo de ciclo de ocho horas es suficiente para que mientras uno de los lechos opere el otro se regenera (Ruthven, 1994).

III.3.2.6.Equipos Auxiliares

III.3.2.6.1. Compresores CP-III.1 y CP-III.

A la salida del proceso de electrólisis se obtienen 2822.23 kg/h de una corriente gaseosa de hidrógeno y agua, a 3 bar, que debe comprimirse hasta los 12.2 bares para llevar a cabo la etapa de adsorción.

La temperatura a la salida del compresor se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$T_2 = T_1 \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} \quad [\text{III.14}]$$

Donde:

k : Relación de calores específicos, 1.4 para gases diatómicos.

P_1 y P_2 : presiones de entrada y salida del compresor, respectivamente (bar).

T_1 y T_2 : temperaturas de entrada y salida del compresor, respectivamente (K).

En el caso de realizar la compresión en una única etapa, la temperatura de salida del compresor sería de 261 °C. Siguiendo las recomendaciones de las reglas heurísticas la temperatura a la salida del compresor no debe superar los 200 °C por lo que es necesario llevar a cabo la operación en dos etapas, con una refrigeración intermedia (Walas, 1998).

Por otro lado, se busca que la temperatura de salida del segundo compresor sea lo más cercana posible a la temperatura a la que se realizará la adsorción (50 °C). Sin embargo, hay que tener en cuenta que la corriente gaseosa tiene vapor de agua que puede llegar a condensarse, si la temperatura de refrigeración es menor que la temperatura de rocío.

En primer lugar, la presión de saturación del vapor de agua se relaciona con la temperatura de rocío mediante la Ecuación de Antoine:

$$\log_{10} P^0 = A - \frac{B}{T^0 + C} \quad [\text{III.15}]$$

Donde:

P^0 : presión de vapor de agua (mmHg).

T^0 : temperatura de rocío ($^{\circ}\text{C}$).

A, B y C son parámetros que dependen de las unidades de presión empleadas y de la sustancia. Para el agua toman los valores de A:8.07, B:1730.63 y C: 233.43.

La temperatura de rocío se determina a la salida de cada compresor, ya que corresponde a la situación más restrictiva del equipo y la presión del vapor de agua se calcula con el producto de $y_{\text{H}_2\text{O}}$ (0.002) y la presión de salida. Finalmente, en la Tabla III.X se muestran los resultados obtenidos para cada uno de los compresores.

Entre las dos etapas de compresión se lleva a cabo una refrigeración para enfriar la corriente gaseosa hasta los 56°C , mayor que la temperatura de rocío por lo que el agua no condensa. La caída de presión que tiene lugar entre compresores y el resto del diseño de la etapa de refrigeración se desarrolla en el Apartado III.3.2.6.2

Tabla III.X. Valores de presión y temperatura de la corriente gaseosa en cada compresor.

	P_1	P_2	T_1	T_2	T^0
	(bar)	(bar)	($^{\circ}\text{C}$)	($^{\circ}\text{C}$)	($^{\circ}\text{C}$)
CP-III.1	3.00	6.89	100	200	11.8
CP-III.2	6.39	12.25	56	122.8	20.82

A continuación, con el objetivo de seleccionar los compresores más adecuados para el proceso se calcula la potencia real del compresor (HP), como el cociente de la potencia teórica (THP) y la eficiencia del equipo (η). La potencia teórica se calcula a partir de la Ecuación III.16 y el valor supuesto de eficiencia es del 78% (compresores centrífugos) (Walas, 1998).

$$THP = \left[\frac{(SCFM)T_1}{8130 a} \right] \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^a - 1 \right] \quad [\text{III.16}]$$

Donde:

$SCFM$: caudal de entrada, en condiciones de 1 bar y 15 °C (ft^3/min).

$T_1: (^\circ\text{F}) + 460$.

$a: 0.286$.

En la Tabla III.XI se muestra a modo de resumen los resultados obtenidos de cada compresor que permiten la elección del más apropiado dentro del catálogo.

Tabla III.XI. Potencia real calculada para los compresores CP-III.1 y CP-III.2.

	P_1 (bar)	P_2 (bar)	v (m^3/h)	HP (caballos)
CP-III.1	3.00	6.89	14 247.14	1 935.86
CP-III.2	6.39	12.25	5 900.13	1 301.48

Por otro lado, a partir de la Figura III.6. se ha comprobado que el tipo de compresor más adecuado para cada etapa sea el centrífugo, en función del caudal de gas de entrada y la presión de descarga del compresor.

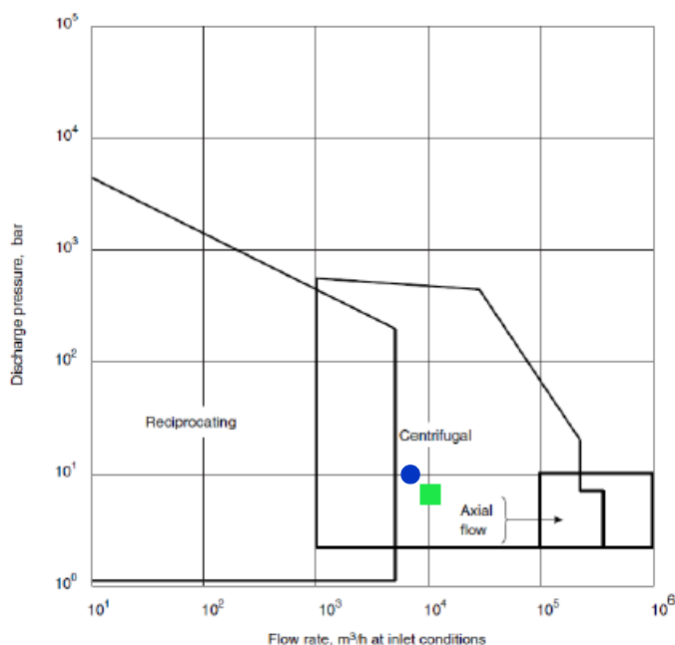


Fig.III.6. Selección del tipo de compresor en función del caudal de entrada (m^3/h) y la presión de descarga (bar). CP-III.1 (■), CP-III.2 (●) (Research Gate, 2025).

Para ambos compresores, con caudales de entrada de 12 490 m^3/h y 5 173 m^3/h , respectivamente y presiones de descarga de 6.9 bar y 12.2 bar, se verifica que el tipo de

compresor más adecuado es el centrífugo. Finalmente, en función de los parámetros de operación de cada etapa se ha seleccionado en los catálogos comerciales el compresor centrífugo más adecuado (Figura III-B.1 del Apéndice B).

III.3.2.6.2. Intercambiadores de calor C-II.1 , C-III.2 y C-III.3

Los intercambiadores de calor de carcasa y tubos ofrecen una amplia variedad de alternativas de diseño y condiciones de funcionamiento. Estos equipos son capaces de soportar presiones elevadas, se puede fabricar con una amplia variedad de materiales de construcción (en función del fluido que circule) y se pueden desmontar fácilmente para su limpieza o reparación (Towler y Sinnott, 2008; Heat Transfer and Heat Exchangers, 2010). En los cambiadores de carcasa y tubo se puede suponer un valor de 0.5 bar como caída de presión (Walas, 1998). Gracias a sus características, resultan apropiados para calentar el agua de entrada al proceso de electrólisis, enfriar la corriente de hidrógeno durante la etapa de compresión y previamente a la etapa de adsorción.

El calor intercambiado (Q) en los cambiadores del proceso se calcula mediante la Ecuación III.17.

$$Q = mC_p(T_1 - T_2) \quad [\text{III.17}]$$

Donde:

Q : calor intercambiado (kW)

m : flujo másico de la corriente (kg/s).

C_p : calor específico (kJ/kg °C) de la corriente a la temperatura media.

A continuación, suponiendo de que las pérdidas de energía son mínimas (comportamiento adiabático), se considera que el calor intercambiado es el mismo que el calor que absorbe el fluido refrigerante o el que cede el fluido calefactor.

En el caso de la corriente 34, aunque el flujo se encuentra dividido en 4 tuberías en paralelo se hacen los cálculos para un único cambiador de calor (C-III.1) que utiliza como fluido calefactor vapor de agua a baja presión (30 psig) y 135 °C suponiendo ΔT de 1 °C.

En los cambiadores C.III-2 y C.III-3 (corrientes 36.2 y 36.3 respectivamente) se ha optado por emplear agua como fluido refrigerante, que entrará a 32 °C en ambos casos. El agua de refrigeración saldrá a 46 °C y 40 °C , manteniendo una diferencia de temperatura mínima ($\Delta T_{\min}$) de 10 °C entre el fluido caliente y frío (Walas, 1998).

En la industria, el fluido que circula por el lado de los tubos es generalmente aquel que tiene mayor presión y temperatura. Por lo tanto, en el primer intercambiador, será el vapor de agua quien circule a través de los tubos y el agua de desionizada a través de la carcasa. En los intercambiadores posteriores, la corriente gaseosa circulará a través de los tubos y el agua de refrigeración por el lado de la carcasa (Heat Transfer and Heat Exchangers, 2010). Los caudales de fluido refrigerante y calefactor se calculan a partir de las siguientes ecuaciones:

$$Q = m_h \lambda_h \quad [\text{III.18}]$$

$$Q = m_c C_p (T_{c,o} - T_{c,i}) \quad [\text{III.19}]$$

Donde los subíndices h y c, hacen referencia al fluido frío y caliente, mientras que i y o hacen referencia a la entrada y salida:

Q : calor intercambiado (kW)

m_h, m_c : flujo másico del fluido.(kg/s)

λ_h : calor latente de vaporización (kJ/kg)

$C_{p,\text{servicio}}$: calor específico del servicio externo (kJ/kg °C)

$T_{c,i}$ y $T_{c,o}$: temperatura de entrada y salida del fluido refrigerante.(°C)

Finalmente, una vez conocidos el calor intercambiado y las temperaturas de entrada y salida de las corrientes del cambiador, se procede a calcular el área de transmisión de calor (A) a partir de la Ecuación III.20 (Incropera, 2013).

$$Q = UA\Delta T_{ml} \quad [\text{III.20}]$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_{h,o} - T_{c,i}) - (T_{h,i} - T_{c,o})}{\ln\left(\frac{T_{h,o} - T_{c,i}}{T_{h,i} - T_{c,o}}\right)} \quad [\text{III.21}]$$

Donde:

Q : calor intercambiado (kW)

U : coeficiente de transmisión de calor (kW/°Cm²)

ΔT_{ml} : diferencia de temperatura logarítmica (°C)

Los valores de U en función del fluido frío y caliente se han obtenido de la bibliografía mostrándose en la Tabla III.XII su valor (Towler y Sinnott, 2008).

Tabla III.XII. Valores de U para cambiadores de carcasa y tubo en función de la naturaleza de los fluidos.

Intercambiador de calor	Fluido Caliente	Fluido Frío	U medio (kW/m ² °C)
1	Vapor de agua	Agua declorada y desionizada	2.75
2 y 3	Gas	Agua	0.16

En la Tabla III.XIII se muestran los resultados obtenidos para cada intercambiador de calor, a partir de las ecuaciones anteriores y los valores de λ_h y C_p empleados (EngineeringToolbox, 2025) (AspenHysis Analyzer, 2019). Se ha verificado que los valores obtenidos de A entran en el intervalo que muestra la bibliografía (3-1000 m²) (Peters, Timmerhaus y West, 2003).

Tabla III.XIII. Área de transmisión de los cambiadores C-II.1 ,C-III.2 y C-III.3.

Intercambiador de calor		C-III.1	C-III.2	C-III.3
m	(kg/s)	9.30	0.78	0.78
Q	(kW)	2 692	1 560	800
C_p	(kJ/kg°C)	4.19	14.0	13.9
$C_{p,servicio}$	(kJ/kg°C)	-	4.18	4.19
$\lambda_{servicio}$	(kJ/kg)	2 159.1	-	-
m_h	(kg/s)	1.25	-	-
m_c	(kg/s)	-	27.00	23.87
$T_{c,i}$	(°C)	16	32	32
$T_{c,o}$	(°C)	85	46	40
$T_{h,i}$	(°C)	135	200	123
$T_{h,o}$	(°C)	136	56	40
ΔT_{ml}	(°C)	80	70	43
U	(kW/m ² °C)	2.75	0.16	0.16
A	(m ²)	12.2	141.2	117.3

III.4.DISEÑO MECÁNICO

III.4.1.DISEÑO MECÁNICO DE LA TORRE DE ADSORCIÓN AD-III.1

En este apartado, se llevará a cabo el diseño mecánico de una pared cilíndrica y de los cabezales semiesféricos de la torre de adsorción (AD-III.1) a partir del código ASME de calderas y recipientes a presión. Finalmente, el coste del equipo se estimará en base al peso del material necesario (Apartado III.5.1.6.).

III.4.1.1.Presión de diseño

A la hora de diseñar la torre se tiene en cuenta que la presión de diseño debe ser mayor que la presión de operación por motivos de seguridad ante posibles sobrepresiones. Tomando como referencia las reglas heurísticas de la ingeniería química, la presión máxima de operación debe ser 1.7 bar mayor que la presión normal de operación (Walas, 1998). En el caso de estudio, la presión de operación es de 11.7 bar, por lo tanto, la presión máxima de operación es de 13.4 bar. Finalmente, la presión de diseño se determina como el valor mayor obtenido, entre añadir un 10% o sumarle 1.7 bar a la presión máxima de operación. Siguiendo esta regla, la presión del diseño de la torre de adsorción es de 15.1 bar.

III.4.1.2.Grosor del tanque

Para el cálculo del grosor de la pared de carcasa cilíndrica que constituye la torre de adsorción, se emplea la Ecuación I.25.

$$t = \frac{P r_i}{SE_j - 0.6P} + C_c$$

Por otro lado, para el cabezal semiesférico se emplea la Ecuación III.22 o III.23 en función de la condiciones límite (Peters, Timmerhaus y West, 2003)

	Condiciones Límite	
$t = \frac{P r_i}{2SE_j - 0.2P} + C_c$	$P \leq 0.665 SE_j$	[III.22]
$t = r_i \left(\frac{2SE_j + P}{2SE_j - P} \right)^{1/3} - r_i + C_c$	$P > 0.665 SE_j$	[III.23]

Las Ecuaciones anteriores emplean la nomenclatura del código ASME explicada en el Apartado I.4.1.

En el diseño de esta torre se ha optado por elegir una doble soldadura de las juntas para un valor de E_j de 1, siendo la máxima eficiencia posible. Esta elección se basa en que se utilizarán soldaduras de alta calidad, completamente revisadas mediante inspección radiográfica completa. Gracias a esto, es posible aprovechar al máximo la resistencia del material, permitiendo un diseño más eficiente y seguro.

A partir de la Tabla III.XIV se observa que para una doble soldadura y una temperatura de operación de 50 °C, el valor de S es de 94 500 kPa. Además, se ha optado por emplear como material de construcción el acero de baja aleación ya que es resistente al H_2 .

Tabla III.XIV. Tensiones máximas de trabajo del material de construcción (Peters, Timmerhaus y West, 2003).

Metal	Valores recomendados		
	Eficiencia de las juntas	T (°C)	S (kPa)
Acero de baja aleación resistente al H_2 (SA- 387, Gr.12C1.1)	Doble Soldadura	-29 a 427	94 500
	Radiografiadas = 1.0	510	76 000
	Examinadas en algunos puntos = 0.85	566	34 000
	Sin radiografiar = 0.70	649	7 000

En la Tabla III.XV, se muestran los datos para llevar a cabo los cálculos de los grosores de la pared y del cabezal. Se debe tener en cuenta que los resultados obtenidos serán diferentes, por lo tanto, se elegirá para el grosor de la torre el mayor valor de los dos.

Tabla III.XV. Datos para el cálculo del grosor de pared la torre.

P (kPa)	r_i (m)	S (kPa)	E_j	C_c (m)
1 510	0.74	94 500	1	0.003

A partir de los datos de la Tabla III.XV y sustituyendo los datos correspondientes en la Ecuación I.25 se obtiene un valor de $t=0.0159$ m para la carcasa cilíndrica.

Para la carcasa semiesférica, se obtiene que $P < 0.665 SE_j$. Al cumplirse esta condición se emplea la Ecuación III.22 para calcular el grosor del cabezal obteniendo un valor de $t=0.0094$ m.

De ambos valores el mayor es 0.0159 m, que además es superior al mínimo requerido para soldadura (0.0024 m). Con este valor seleccionado se estima el volumen de acero necesario para construir el tanque.

Para calcular este volumen, puesto que el grosor es inferior a las dimensiones del tanque, se aproxima como el producto de la superficie por el grosor, teniendo en cuenta como superficie la del cuerpo cilíndrico ($2\pi rL$) y la de los cabezales semiesféricos ($2\pi r^2$).

$$\text{Volumen} = (2\pi rL + 2(2\pi r^2)) t = (2\pi 0.8 \cdot 3.2 + 4\pi (0.8)^2) 0.0159 = 0.38 \text{ m}^3$$

El valor de la densidad proporcionado por la fuente consultada es de 7833 kg/m³ (Peters, Timmerhaus y West, 2003). De este modo, a partir del producto del volumen de acero y la densidad, se obtiene la masa de acero necesaria, 3 006 kg .

El peso total que incluye conexiones, bocas y soportes supone un 20 % más si la instalación es en posición vertical siendo de 3 607 kg de acero.

III.5.EVALUACIÓN ECONÓMICA

III.5.1.EQUIPOS

Algunas de las ecuaciones y figuradas empleadas para la estimación de los costes de equipos fueron desarrolladas en los años 2002, 2003 y 2010, por lo que será necesario actualizarlos teniendo en cuenta la inflación, siguiendo el mismo procedimiento ya detallado en el Apartado I.5.1 de esta memoria.

En algunos casos no ha sido posible encontrar en los catálogos comerciales el precio de algunos equipos, por lo que se toma como referencia el precio de equipos similares de distinta capacidad y a partir de la Ecuación III.24 se calcula de manera aproximada el coste del equipo empleado.

$$\text{Coste del equipo } a = \text{Coste del equipo } b \left(\frac{\text{Capacidad equipo } a}{\text{Capacidad equipo } b} \right)^{0.6} \quad [\text{III.24}]$$

III.5.1.1.Filtros de partículas sólidas F-III.1

De acuerdo con los cálculos del apartado III.3.2.1.1, son necesarios 5 filtros (modelo “NW 800” de la marca Cintropur) y un precio de compra de 522.09 € cada uno (Cintropur, 2025), representa un coste total de 2 610.45 €.

III.5.1.2.Filtros decoloradores FDC-III.1

Según se ha detallado en el apartado III.3.2.1, son necesarios 4 sistemas compuestos por 3 filtros cada uno, en total de 12 filtros decoloradores (Empresa Hidrowater, 2025).

En este caso, solo se ha encontrado disponible el precio de un filtro decolorador de 10 m³/h de capacidad, 3 052.00 € (Filtro decolorador Mod. DCMg-500, 2025). Por lo tanto, a partir de la Ecuación III.24 se calcula el precio equivalente de un filtro decolorador de capacidad de 74.48 m³/h. El precio equivalente de un filtro de esta capacidad es 8 016.16 €, por lo que para 12 filtros empleados el coste total es de 96 193.95 €.

III.5.1.3.Membranas ósmosis inversa RO-III.1 y RO-III.2

En el apartado III.3.2.2.3 se ha visto como óptima la configuración del caso 2, de los 3 planteados, que requiere de 120 membranas en total (modelo FilmTec™ BW30HRLE-440) con un precio de compra de 1 092.80 \$ cada una (ServAPure, 2025), equivalente a 950.74 €, lo que representa un coste total de 114 088.32 €.

III.5.1.4.Electrodesionizador EDI-III.1

De acuerdo con los cálculos del apartado III.3.2.3, son necesarios 4 sistemas EDI del que solo se ha encontrado disponible el precio de un sistema de 3 m³/h de capacidad, 18 000 \$ (Xi'an Xinshengtai, 2025). Por lo tanto, a partir de la Ecuación III.24 se calcula el precio equivalente de un sistema EDI de 10 m³/h de capacidad, 37 068.05 \$, que equivalen a 32 249.20 €, por lo que 4 equipos suponen un coste total de 128 996.82 €.

III.5.1.5.Electrolizador E-III.1

El precio de un electrolizador depende de la potencia y del tipo de electrolizador. En el caso de la electrólisis alcalina es de 345\$/kW (300.15 €/kW), lo que represente un coste total de 42 511 445.10 € para un sistema de 141 634 kW (Chang y Rajuli, 2024).

III.5.1.6.Torre de adsorción AD-III.1

En el Apartado III.4.2.2. se ha calculado el peso de acero necesario para fabricar cada torre de adsorción. En concreto, se necesitarán 3 607 kg de acero “low alloy” por torre, con un precio por tonelada de 590 \$, equivalente a 513.30 € (Alibaba, 2025), el coste de material de cada torre es de 1 851.47 €. Este precio debe multiplicarse por un factor de corrección correspondiente al precio de fabricación de la torre a partir del acero 4.16, con lo que el precio total de cada torre ascenderá a 7 702.13 € (Peters, Timmerhaus y West, 2003).

Además, al coste de fabricación de la torre, hay que sumarle el precio de los lechos de adsorción. Según el proveedor consultado (Alibaba, 2025) el precio de la zeolita 3A es de 2.44 €/kg. Por lo tanto, considerando una masa de zeolita necesaria de 2 973 kg en cada torre el coste total es de 7 242.23 € cada lecho.

Finalmente, el coste de una torre de adsorción es de 14 944.36 €, siendo un total de 29 888.71 € el coste de las dos torres.

III.5.1.7.Compresores CP-1 y CP-2

Para el cálculo del precio de los compresores (k\$) se ha aplicado la Ecuación III.25 (Costs of individual equipment, 2010) en función de la potencia del compresor en caballos.

$$C_{compresor} = 7.19 (HP)^{0.61} \text{ Aplicable para } 100 < HP < 20\,000 \quad [III.25]$$

En la Tabla III.XVI se muestran los cálculos realizados para los compresores CP-III.1 y CP-III.2

Tabla III.XVI. Costes de los compresores CP-III.1 y CP-III.2.

Equipo	Potencia (HP)	Precio (k\$,2003)	Precio (k\$,2025)	Precio (€,2025)
CP-III.1	1 935.86	727.31	632.76	1 237 372.40
CP-III.2	1 301.48	570.87	496.65	971 210.98

III.5.1.8. Intercambiadores de calor C-III.1, C-III.2 y C-III.3

Una vez determinado el área de intercambio de calor, se procede a la estimación del coste de los intercambiadores de calor haciendo uso de la Figura III-B.5. El resultado se obtiene en dólares del año 2002 por lo que a partir de la Ecuación I.27 se realiza la conversión al valor actual y después se aplica el cambio de moneda. En la Tabla III.XVII se recogen los cálculos realizados

Tabla III.XVII. Coste de los intercambiadores de calor de la Sección III.

Equipo	A (m ²)	Precio (\$,2002)	Precio (€,2025)
C-III.1	12.20	3 500	6 055.36
C-III.1	141.18	15 000	25 951.55
C-III.1	117.30	13 000	22 491.35

III.5.1.9. Bombas B-III.1, B-III.2, B-III.3, B-III.4 y B-III.5

A partir de la capacidad de la bomba (Apartado 6.2.2.2) se estima el coste en dólares del año 2002 mediante la Figura III-B.6. Después se realiza la conversión (Ecuación I.27) al valor actual y posteriormente se aplica el cambio de moneda. En este caso las corrientes impulsadas son de agua por lo que se pueden emplear las bombas de hierro fundido cuyo factor de ajuste es 1, ya que no hay riesgo de corrosión.

Además, las presiones de operación se encuentran por debajo del valor de 1 035 kPa (10.35 bar) por lo que el ajuste del factor de presión también es 1. En la Tabla III.XVII se muestran los precios obtenidos para cada bomba

Tabla III.XVIII. Coste de las bombas de la Sección III.

Equipo	Capacidad (m ³ /s)	Precio (\$,2002)	Precio (€,2025)
B-III.1	0.04	5 500.00	9 515.57
B-III.2	0.04	5 500.00	9 515.57
B-III.3	0.04	5 500.00	9 515.57
B-III.4	0.21	9 500.00	16 435.98
B-III.5	0.17	8 000.00	13 840.83

III.5.2.CONSUMIBLES

III.5.2.1.Vapor Vivo

El cambiador C-III.1 requiere un flujo másico de 1.25 kg/s. Considerando que la planta trabaja 24 h al día, 330 días al año, las necesidades de vapor vivo son de 35 554 690 kg/año.

III.5.2.2.Refrigerante

Sumando las necesidades de agua como refrigerante de los dos cambiadores de calor, C-III.2 y C-III.3 se obtiene que se necesitan 50.9 kg/s. Estos cambiadores trabajan en continuo en un circuito cerrado, siendo las pérdidas de refrigerante en sistemas industriales de estas características en un 7% anual (Merz et al., 2005).

No es posible conocer con exactitud la masa de refrigerante que contiene el sistema, así que para estimar las pérdidas de refrigerante se va a suponer de forma arbitraria que el sistema completo tenga suficiente agua para suplir las necesidades de refrigeración durante 15 minutos, esto son 45 810 kg de agua. Considerando el 7% de pérdidas, se estima que las necesidades de agua de refrigeración son de 3 207 kg/año.

III.5.2.3.Electricidad

En la Tabla III.XIX se muestra el consumo eléctrico de los equipos principales. El consumo eléctrico del sistema de electrólisis y de los sistemas EDI se calcula a partir de Los valores de potencia calculados en los Apartados III.3.2.3 y III.3.2.4 .

Por otra parte, el consumo eléctrico de los compresores viene determinado por el HP (Apartado 3.2.6.1) teniendo en cuenta que 1 hp (caballo) son 0.75 kW. Para las bombas centrífugas la potencia se calcula mediante la Ecuación III.26 cuyos términos están definidos (Apartado 6.2.2.2.)

$$P_e(kW) = \frac{\rho \, v \, g \, H}{1000 \, \eta} \quad [\text{III.26}]$$

Tabla III.XIX. Consumo eléctrico anual de la Sección III.

Equipo	Potencia Total (kW)	Consumo anual (MWh/año)
EDI	8.32	65.89
Electrolizadores	141 643.00	1 121 812.56
CP-III.1	1 272.65	10 079.41
CP-III.2	1 451.90	5 058.09
B-III.1	976.11	412.79
B-III.2	0.19	1.49
B-III.3	0.34	2.73
B-III.4	0.93	7.35
B-III.5	23.41	185.43
TOTAL	144 156.32	1 141 718.03

III.5.2.4.Mantenimiento de los lechos

Los sólidos de los lechos de adsorción no son un consumible como tal, sino más bien un gasto de mantenimiento. Sin embargo, es un aspecto importante para tener en cuenta, ya que la vida útil del lecho está limitada en 5 años (Molecular Sieve Desiccant | Zeolite Granules | Molecular Sieve Beads, 2025). Por tanto, transcurrido ese tiempo será necesario hacer una nueva inversión. El coste total de los lechos de adsorción (conteniendo 2973 kg de zeolita 3A cada uno) se estima en 14 484.46 € que, dividido en los 5 años de vida útil, suponen 7 242.23 €/año.

III.6.BIBLIOGRAFÍA

ALIBABA, 2025. Astm A283 Gr C A387 A36 Q235 Q345 Ss400 2mm 4mm High Precision Ms Mild Low Alloy Iron Cold Rolled Carbon Steel Sheet Plate - Buy Carbon Steel Sheet,Cold Rolled Carbon Steel Sheet,Black Carbon Steel Sheet Product on Alibaba.com. *www.alibaba.com* [en línea]. [consulta: 23 junio 2025]. Disponible en: https://www.alibaba.com/product-detail/ASTM-A283-Gr-C-A387-A36_1600668064538.html.

ALVARADO, L. y CHEN, A., 2014. Electrodeionization: Principles, Strategies and Applications. *Electrochimica Acta*, vol. 132, pp. 583-597. ISSN 00134686. DOI 10.1016/j.electacta.2014.03.165.

AspenHysis Analyzer, 2019. S.I.: s.n.

Ayuntamiento de Gijón - Agua: Teléfono y Horario. [en línea], 2025. [consulta: 30 abril 2025]. Disponible en: <https://tarifasdeagua.es/oficinas/asturias/gijon>.

CESCON, A. y JIANG, J.-Q., 2020. Filtration Process and Alternative Filter Media Material in Water Treatment. *Water*, vol. 12, no. 12, pp. 3377. ISSN 2073-4441. DOI 10.3390/w12123377.

CHANG, S.H. y RAJULI, M.F., 2024. An overview of pure hydrogen production via electrolysis and hydrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 84, pp. 521-538. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2024.08.245.

CHOI, E., 2024. Guide to ASTM High Purity Water Quality Standards. *Puretec Industrial Water* [en línea]. [consulta: 25 abril 2025]. Disponible en: <https://puretecwater.com/resources/high-purity-water-quality-standards/>.

CINTROPUR, 2025. COMPRAR FILTRO DE AGUA CINTROPUR NW800 (3") ELIMINA SEDIMENTOS Y PARTÍCULAS SÓLIDAS. *SETASA Filtración* [en línea]. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: <https://setasa.es/>

COSTS OF INDIVIDUAL EQUIPMENT. *Chemical Process Equipment* [en línea], 2010. S.I.: Elsevier, pp. 717-726. [consulta: 12 junio 2025]. ISBN 978-0-12-372506-6. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123725066000198>.

E-Cell Electrodeionization (EDI) Stack. , 2024.

ENGINEERINGTOOLBOX, 2025. Hydrogen - Thermophysical Properties. [en línea]. [consulta: 7 julio 2025]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/hydrogen-d_1419.html.

Estimated Percent Rejection of Various Solutes by FILMTEC™ Membranes. , 2019.

FICHA TÉCNICA FILTRO AUTOMÁTICO DECLORADOR, 2025. *Ficha técnica filtro automático declorador (FDC) Hidrowater*. S.l.: s.n. Ficha técnica filtro automático declorador (FDC) Hidrowater,

FICHA TÉCNICA MEMBRANA BW30HRLE 440, 2025. Ficha técnica membrana BW30HRLE 440 FilmTec. . S.l.: s.n.,

FICHAS TÉCNICAS CINTROPUR, 2025. Fichas técnicas de filtros industriales y semiindustriales Cintropur. . S.l.: s.n.,

Filtro de Carbón Activo. *H2agua| Equipos para tratamiento de agua* [en línea], 2025. [consulta: 19 mayo 2025]. Disponible en: <https://www.h2agua.com/filtros-agua/lecho/filtro-declorador>.

Filtro declorador Mod. DCMg-500. *Hidro Server* [en línea], 2025. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: <http://tiendahidroserver.es/decloradores/129-Filtro-declorador-Mod-DCMg-500.html>.

Filtros de Carbón Activado Membrom. *Membranas Osmosis Inversa* [en línea], 2025. [consulta: 28 junio 2025]. Disponible en: <https://www.membrom-osmosis.com/filtros-de-carbon-activado/>.

HEAT TRANSFER AND HEAT EXCHANGERS. *Chemical Process Equipment* [en línea], 2010. S.l.: Elsevier, pp. 159-218. [consulta: 12 junio 2025]. ISBN 978-0-12-372506-6. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123725066000095>.

HOU, J. y YANG, M., 2024. *Green Hydrogen Production by Water Electrolysis* [en línea]. 1. Boca Raton: CRC Press. [consulta: 5 marzo 2025]. ISBN 978-1-003-36893-9. Disponible en: <https://www.taylorfrancis.com/books/9781003368939>.

HU, S., GUO, B., DING, S., YANG, F., DANG, J., LIU, B., GU, J., MA, J. y OUYANG, M., 2022. A comprehensive review of alkaline water electrolysis mathematical modeling. *Applied Energy*, vol. 327, pp. 120099. ISSN 03062619. DOI 10.1016/j.apenergy.2022.120099.

INCROPERA, F.P., 2013. *Foundations of heat transfer: Frank P. Incropera ... [et al.]* [en línea]. Singapore: John Wiley. [consulta: 29 mayo 2025]. ISBN 978-1-118-65358-6. Disponible en: <https://research.ebsco.com/linkprocessor/plink?id=4b02d4e8-ab66-30b0-8506-ee8e6a427b57>.

LADSHAW, A., YIACOUMI, S., TSOURIS, C. y DEPAOLI, D., 2015. Generalized gas–solid adsorption modeling: Single-component equilibria. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 388, pp. 169-181. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2015.01.003.

LI, B., ZHANG, H., ZHANG, W., HUANG, L., DUAN, J., HU, J. y YING, W., 2010. Cost effective activated carbon treatment process for removing free chlorine from water. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, vol. 5, no. 5, pp. 714-720. ISSN 1932-2135, 1932-2143. DOI 10.1002/apj.396.

MANUAL PARA MEMBRANAS RO-FILMTEC (EXTRACTO), 2022. Manual técnico de Membranas RO-FilmTec (extracto). *Extracto del Manual técnico de membranas de ósmosis inversa FilmTec™ (Formulario n.º 45-D01504-en), capítulo 2, «Química del agua y pretratamiento»*. S.l.: s.n.,

MANUAL TÉCNICO DE MEMBRANAS RO-FILMTEC, 2024. *RO-NF-FilmTec-Manual-45-D01504-en*. 2024. S.l.: s.n.

Material de adsorción y tamices moleculares | Compresores BERG. *berg Kompressoren* [en línea], 2025. [consulta: 23 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.berg-kompressoren.de/es/repuestos/material-de-adsorcion/>.

MCCABE, W.L., SMITH, J.C. y HARRIOTT, P., 2007. *Operaciones unitarias en ingeniería química*. 7 ed. Madrid: McGraw-Hill. ISBN 978-84-481-1918-8.

MOBILE, U.E.G., 2024. Whater. [en línea]. [consulta: 30 abril 2025]. Disponible en: <https://whater.app/public/analytical/show/id/1068f269-6915-4c37-b534-efce3c17591f>.

Molecular Sieve 3A from China Manufacturer - Chemxin. [en línea], 2025. [consulta: 23 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.chemxin.com/Molecular-Sieve-3A-pd40934710.html>.

Molecular Sieve Desiccant | Zeolite Granules | Molecular Sieve Beads. [en línea], 2025. [consulta: 25 junio 2025]. Disponible en: <https://www.molecularsievedesiccants.com/>.

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. Fifth. S.l.: Mc Graw Hill. ISBN 0-07-239266-5.

QASIM, M., BADRELZAMAN, M., DARWISH, N.N., DARWISH, N.A. y HILAL, N., 2019. Reverse osmosis desalination: A state-of-the-art review. *Desalination*, vol. 459, pp. 59-104. ISSN 00119164. DOI 10.1016/j.desal.2019.02.008.

RAHBARI, A., BRENKMAN, J., HENS, R. y RAMDIN, M., 2019. Supporting Information Solubility of Water in Hydrogen at High Pressures: A Molecular Simulation Study. ,

RESEARCH GATE, 2025. Figure 3 : Compressor Operating ranges for selection [18, pp. 477] and... *ResearchGate* [en línea]. [consulta: 24 junio 2025]. Disponible en: https://www.researchgate.net/figure/Compressor-Operating-ranges-for-selection-18-pp-477-and-24-pp-1_fig5_274075209.

RIBEIRO, Ana.M., SAUER, T.P., GRANDE, C.A., MOREIRA, R.F.P.M., LOUREIRO, J.M.L. y RODRIGUES, A.E., 2008. Adsorption Equilibrium and Kinetics of Water Vapor on Different Adsorbents. ,

RIZWAN, M., ALSTAD, V. y JÄSCHKE, J., 2021. Design considerations for industrial water electrolyzer plants. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 75, pp. 37120-37136. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2021.09.018.

RUTHVEN, D.M., 1984. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. S.l.: s.n.

RUTHVEN, D.M., 1994. *Pressure Swing Adsorption*. S.l.: s.n.

SERVAPURE, 2025. Dupont Filmtec HRLE Element, BW30HRLE-440, 12,650 GPD. *ServApure* [en línea]. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: https://www.servapure.com/Dupont-Filmtec-HRLE-Element-BW30HRLE-440-12650-GPD_p_13758.html.

SIMÕES, S.G., CATARINO, J., PICADO, A., LOPES, T.F., DI BERARDINO, S., AMORIM, F., GÍRIO, F., RANGEL, C.M. y PONCE DE LEÃO, T., 2021. Water availability and water usage solutions for electrolysis in hydrogen production. *Journal of Cleaner Production*, vol. 315, pp. 128124. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2021.128124.

SINAC - Sistema de Informacion Nacional de Aguas de Consumo. [en línea], 2024. [consulta: 30 abril 2025]. Disponible en: <https://sinac.sanidad.gob.es/CiudadanoWeb/ciudadano/detalleBoletin.do>.

Sistemas de agua EDI con electrodesionización - Pure Aqua, Inc. [en línea], 2025. [consulta: 1 mayo 2025]. Disponible en: <https://pureaqua.com/water-electrodeionization-systems/>.

SUTHERLAND, K., 2008. *Filters and filtration handbook*. 5e éd. Oxford: Elsevier/Butterworth-Heinemann. ISBN 978-1-85617-464-0. 660.284 245

TOTALENERGIES, 2025. ¿INSTALACIÓN MONOFÁSICA O TRIFÁSICA? *TotalEnergies* [en línea]. [consulta: 20 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.totalenergies.es/es/pymes/blog/instalacion-monofasica-o-trifasica>.

TOWLER, G. y SINNOTT, R., 2008. *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. Amsterdam Boston: Elsevier/Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-7506-8423-1.

WALAS, S.M., 1998. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. ,

XIA, Y., ZHANG, C., WEI, X., GAO, J., YU, Y. y XIE, W., 2022. Enhancement effect on adsorbent utilization rate based on Twin–Bed tandem adsorption. *Separation and Purification Technology*, vol. 280, pp. 119914. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2021.119914.

XI'AN XINSHENGTAI, 2025. [Hot Item] EDI Module EDI System for Ultrapure Water 3000L/H. *Made-in-China.com* [en línea]. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: <https://sxstwt.en.made-in-china.com/product/QJaRdgnAISVe/China-EDI-Module-EDI-System-for-Ultrapure-Water-3000L-H.html>.

ZENG, K. y ZHANG, D., 2010. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 36, no. 3, pp. 307-326. ISSN 03601285. DOI 10.1016/j.pecs.2009.11.002.

APÉNDICE III-A: LISTA DE SÍMBOLOS

III-A.1.SÍMBOLOS LATINOS

A	Área	J	Flujo específico de la membrana
A_e	Área del electrodo	k	Relación de calores específicos
A_m	Área activa de la membrana	L	Longitud del lecho
A_{mod}	Área de membrana del módulo	m	Flujo másico de la corriente
C	Concentración de sales de la corriente	m_{agua}	Flujo másico de agua
c_0	Concentración inicial de agua en la corriente gaseosa	m_c	Flujo másico del fluido frío
$C_{compresor}$	Coste del compresor	m_h	Flujo másico del fluido caliente
C_p	Calor específico de la corriente	N	Número de equipos
$C_{p,servicio}$	Calor específico del servicio	n_c	Número de celdas
D	Diámetro del lecho	$n_{c,stack}$	Número de celdas total de cada módulo del electrolizador
D_p	Diámetro de partícula	$\tilde{N}_{H_2}^{gen}$	Flujo molar de H_2 generado
D_{poro}	Diámetro de poro	N_m	Número de membranas en cada módulo
E_{AWE}	Consumo eléctrico del electrolizador alcalino	n_{stack}	Número de módulos del electrolizador
F	Constante de Faraday	Nv_{H_2}	Caudal volumétrico de H_2 generado en condiciones normales
f_1	Parámetro de ajuste experimental uno de la eficiencia de faraday	P	Presión
f_2	Parámetro de ajuste experimental dos de la eficiencia de faraday	P^0	Presión de vapor
g	Aceleración de la gravedad	P_1	Presión de entrada a un equipo
H	Entalpía	P_2	Presión de salida a un equipo
H_B	Carga de la bomba	P_{AWE}	Potencia eléctrica del sistema de electrólisis alcalina
i	Densidad de corriente	P_e	Potencia eléctrica
I	Intensidad de corriente eléctrica	Q	Calor intercambiado
I_k	Corriente eléctrica de la celda		

R	Constante de los gases ideales	V_{pmod}	Caudal volumétrico de permeado del módulo
R_{agua}	Recuperación del agua	V_{purga}	Caudal volumétrico de purga
t	Tiempo	V_T	Tensión máxima de una instalación trifásica
T	Temperatura	W_0	Carga de adsorbato en el sólido al inicio del ciclo
t^*	Tiempo de saturación del lecho	W_{sat}	Carga de adsorbato en equilibrio
T^0	Temperatura de rocío	Y_{H_2O}	Fracción molar del agua
T_1	Temperatura de entrada de una corriente a un equipo	z	Número de electrones intercambiados
T_2	Temperatura de salida de una corriente en un equipo		
t_c	Tiempo de ciclo		
$T_{c,i}$	Temperatura de entrada del fluido frío		
$T_{c,o}$	Temperatura de salida del fluido frío		
$T_{h,0}$	Temperatura de salida del fluido caliente		
$T_{h,i}$	Temperatura de entrada del fluido caliente		
T_{max}	Temperatura máxima		
u	Velocidad superficial del gas a través del lecho		
U	Coefficiente de transmisión de calor		
v	Caudal volumétrico		
V	Voltaje		
V_{agua}	Caudal volumétrico de agua		
$V_{ultrapura}$	ultrapura		
V_k	Potencial de cada módulo		
V_{max}	Caudal volumétrico máximo		
V_p	Caudal volumétrico de permeado		
V_{pm}	Caudal volumétrico generado por cada membrana		

III-A.2.SÍMBOLOS GRIEGOS

Δp_b	Caida de presión del lecho
η_F	Eficiencia de Faraday
$\Delta \rho_b$	Densidad del lecho
θ	Saturación del lecho
μ	Viscosidad de la corriente
η	Eficiencia del equipo
λ_h	calor latente de vaporización
ΔT_{ml}	Diferencia de temperatura logarítmica
ϵ	Porosidad
ρ	Densidad de la corriente

III-A.3.ABREVIATURAS

ASTM	American Society for Testing and Materials

AWE	Electrolizador alcalino de agua
EDI	Electrodesionización
HP	Potencia real del compresor
PSA	Adsorción por cambio de presión
RO	Ósmosis inversa
THP	Potencia teórica del compresor
TSA	Adsorción por oscilación de temperatura

III-A.4.NOMENCLATURA PROPIA DEL CÓDIGO ASME

c_c	Margen de grosor por corrosión
E_j	Eficacia de junta
P	Presión de diseño
r_i	Radio interno de la carcasa antes de la adición del margen por corrosión
S	Presión máxima de trabajo
t	Grosor de la pared
W	Peso de material
ρ_m	Densidad del material

APÉNDICE III-B: TABLAS Y GRÁFICAS

Tabla III-B.I. Propiedades del agua de red empleada en el del proceso (Ayuntamiento de Gijón - Agua, 2025; SINAC - Sistema de Informacion Nacional de Aguas de Consumo 2024; Mobile, 2024).

Parámetro	Valor cuantificado
Temperatura (°C)	16
pH	7.7
Dureza Total (ppm)	142
Calcio (ppm)	32
Magnesio (ppm)	5
Potasio (ppm)	0
Cloro(ppm)	0.5

Tabla III-B.II. Propiedades del agua de tipo I y tipo II establecidas por la ASTM.

Parámetro	Tipo I	Tipo II
Resistividad (MΩ-cm)	>18	>1
Conductividad (μS/cm)	<0.056	<1
pH (25 °C)	N/A	N/A
Carbono Orgánico Total (μg/L)	<50	<50
Sodio (μg/L)	<1	<5
Cloro (μg/L)	<1	<5
Sílice (μg/L)	<3	<3

Tabla III-B.III. Cálculos detallados del número de membranas en cada módulo según el caso.

Caso 2					
	V_{pmod} (m ³ /h)	J (m ³ / m ² h)	A_{mod} (m ²)	A_m (m ²)	N_m
Módulo 1	115.20	0.03	3 748.57	41	92
Módulo2	34.56	0.03	1 413.68	41	28
Caso 3					
	V_{pmod} (m ³ /h)	J (m ³ / m ² h)	A_{mod} (m ²)	A_m (m ²)	N_m
Módulo 1	43.44	0.03	1 413.68	41	35
Módulo2	34.56	0.03	1 124.57	41	25

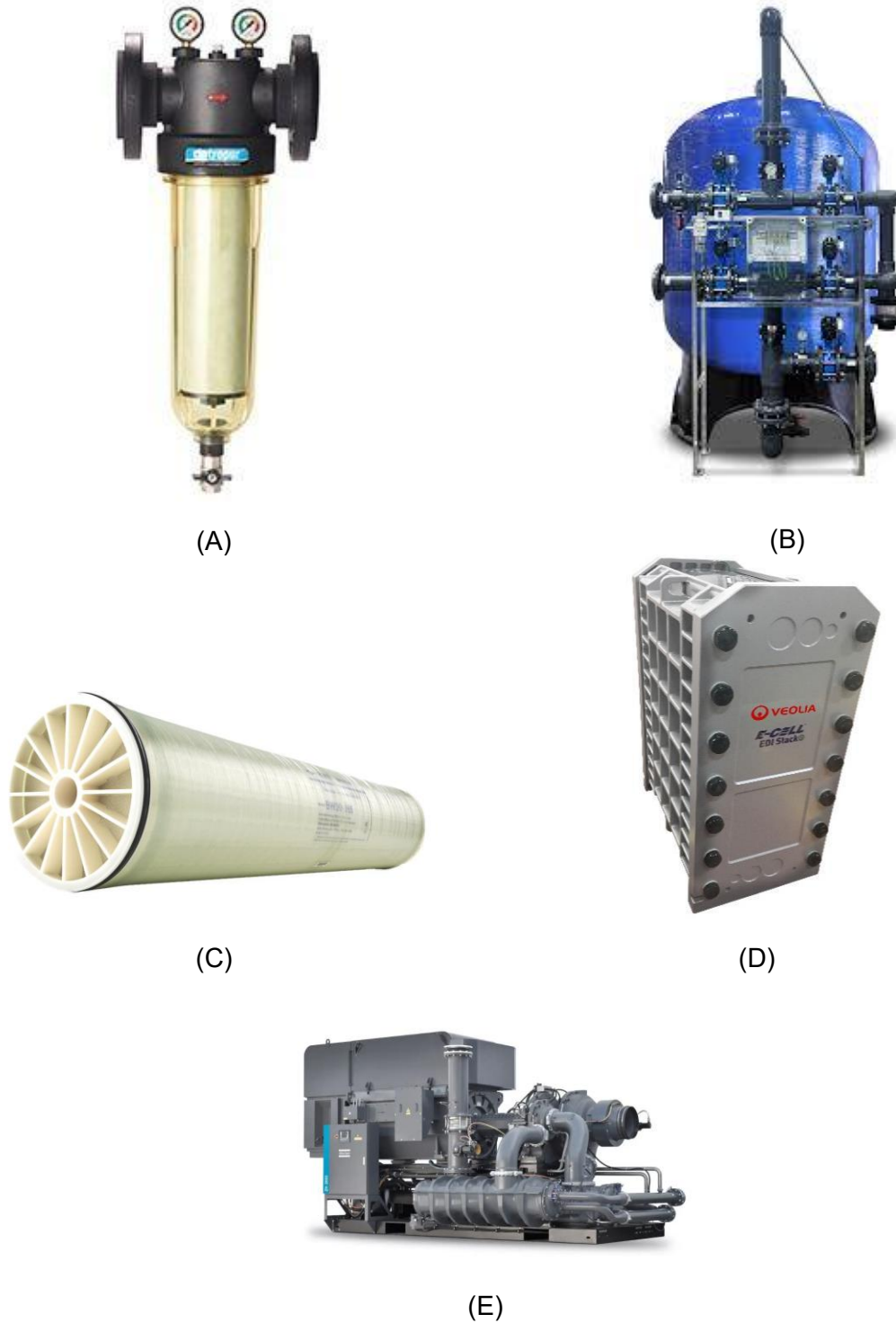


Fig III-B.1. Diversos equipos empleados en esta sección: (A) filtro industrial NW800 de la marca Cintropur; (B) filtro automático decolorador FDC; (C) membrana FilmTec BW30HRLE-440; (D) celda EDI ; (E) compresor centrífugo ZH series (Potencia máxima 3045 Hp , $P_{\max}$ 13 bar y v máximo de 587 m³/min)

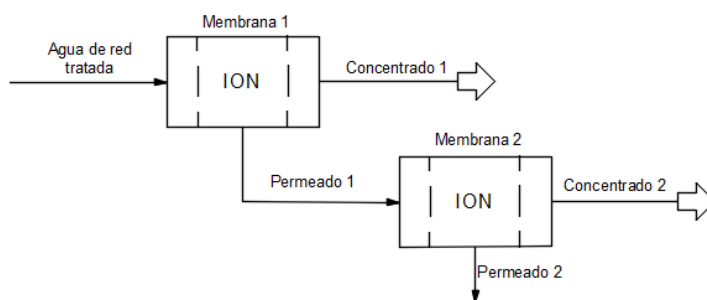


Fig III-B.2. Diagrama de flujo la etapa de ósmosis inversa (caso 1)

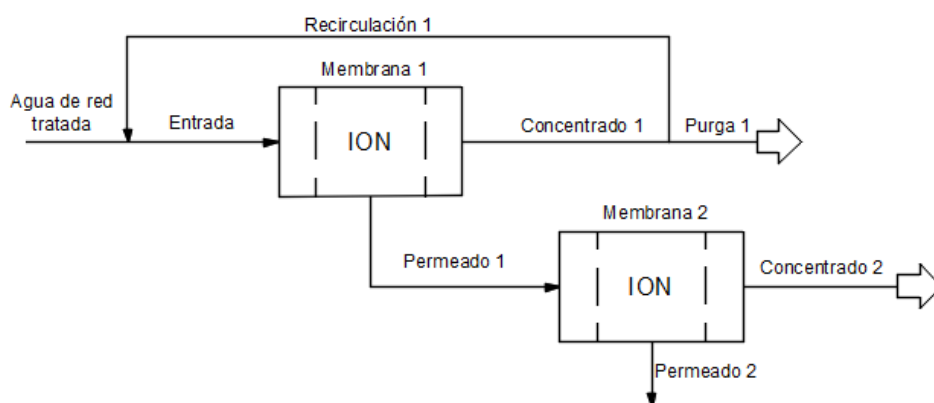


Fig III-B.3. Diagrama de flujo la etapa de ósmosis inversa (caso 2)

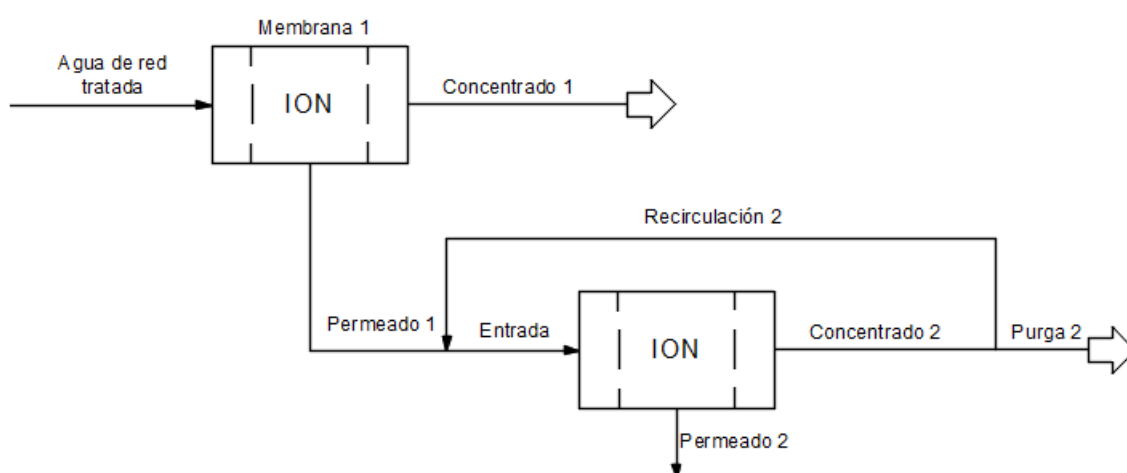


Fig III-B.4. Diagrama de flujo la etapa de ósmosis inversa (caso 3)

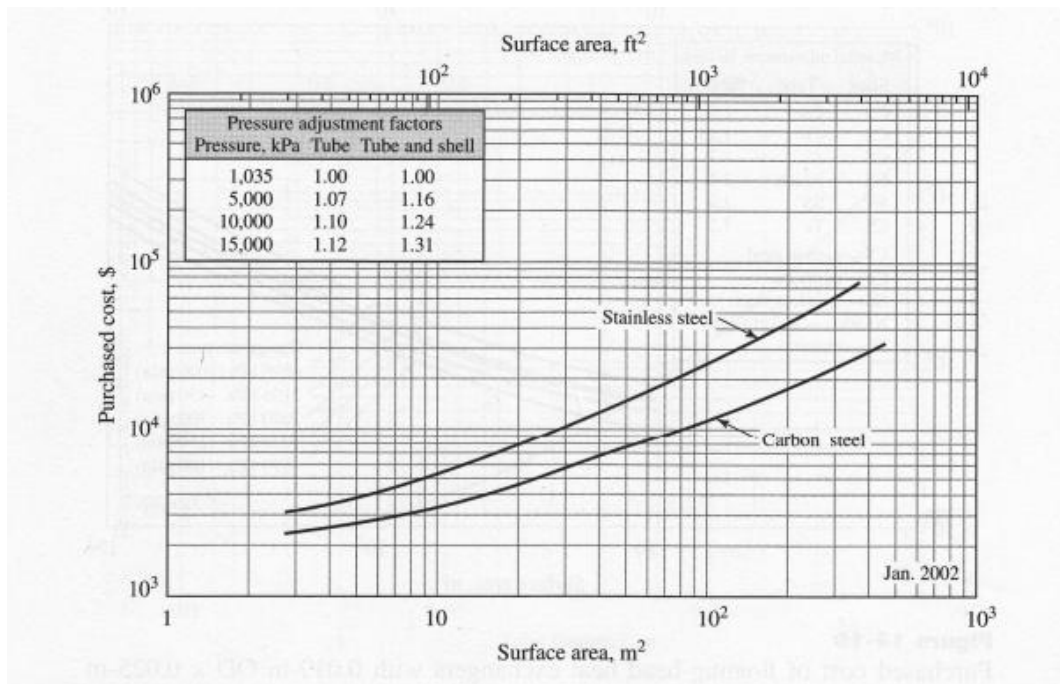


Fig III-B.5. Coste de compra de intercambiadores de calor de carcasa y tubos con forma de U. Pinch cuadrado de 0.0254 m OD x 0.0254 m y tubos de 4.88 m que operan a 1035 kPa (Peters, Timmerhaus y West, 2003).

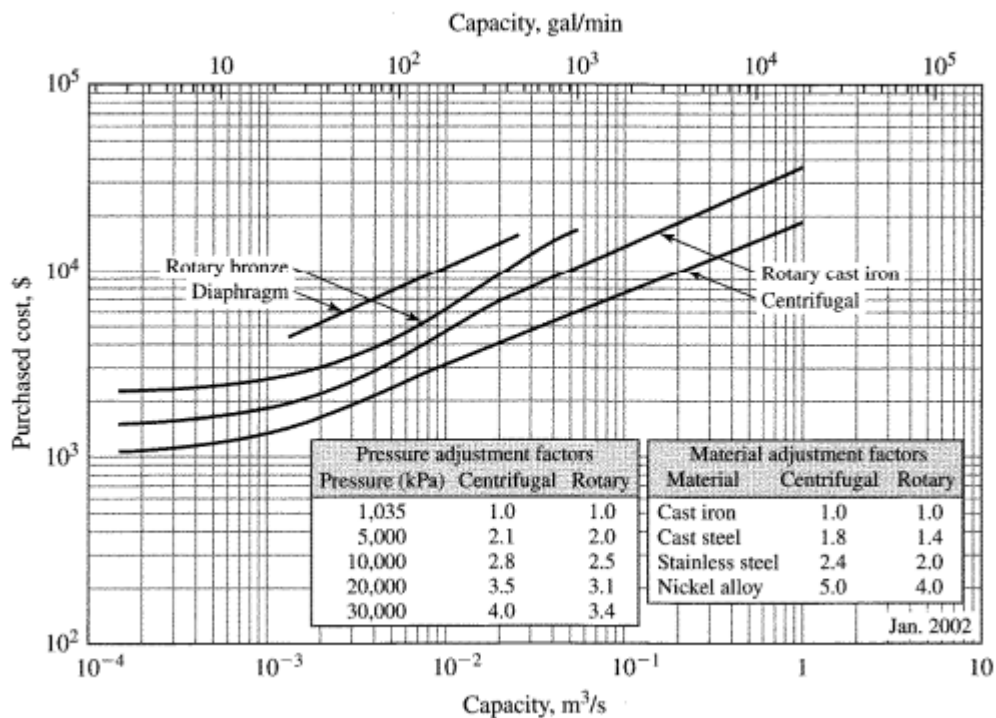


Fig III-B.6. Coste de compra de bombas de diafragma, centrífugas y rotativas (Peters, Timmerhaus y West, 2003).

APÉNDICE III-C: CÁLCULOS ADICIONALES

III-C.1. Cálculos apartado III.3.2.4.

A continuación, se muestra en detalle cálculos complementarios del apartado III.3.4.2.

$$I_K = 0.4 \frac{A}{cm^2} \cdot 30\,000\,cm^2 = 12\,000\,A \quad [III.7]$$

$$\eta_F = \frac{\left(\frac{12\,000\,A}{3\,m^2}\right)^2}{14\,000 \frac{A^2}{m^4} + \left(\frac{12\,000\,A}{3\,m^2}\right)^2} 0.97 = 0.969 \quad [III.8]$$

$$\tilde{N}_{H_2}^{gen} = \eta_F \frac{n_c I_k}{zF}; n_c = \frac{\tilde{N}_{H_2}^{gen} z F}{I_k \eta_F} = \frac{382.08 \frac{mol}{s} \cdot 4 \cdot 96485 \frac{C}{mol}}{12\,000\,A \cdot 0.97} = 6\,340 \quad [III.6]$$

El cálculo de los m³/h de H₂ en condiciones normales (1 atm, 273 K) es el siguiente

$$v_{H_2} = \frac{\tilde{N}_{H_2}^{gen} R T}{P} = \frac{382.08 \frac{mol}{s} \cdot 0.082 \frac{atmL}{Kmol} \cdot 365.5K}{3\,atm} = 3\,817.14 \frac{L}{s}$$

$$N v_{H_2} = 3\,817.14 \frac{L}{s} \cdot \frac{3\,atm \cdot 273\,K}{1\,atm \cdot 365.5K} = 8\,555.32 \frac{L}{s} = 30\,792\,Nm^3/h$$

III-C.2. Cálculos apartado III.3.2.5.

La concentración de entrada (c₀) del adsorbato (agua) se calcula a partir del flujo másico de agua (m_{agua}) y el caudal volumétrico de la corriente mediante la siguiente la expresión:

$$c_0 = \frac{m_{agua} \left(\frac{kg}{h}\right)}{v \left(\frac{m^3}{h}\right)}$$

El caudal volumétrico total se calcula mediante el cociente de m y la densidad ρ de la corriente (0.065 kg/m³) (EngineeringToolbox, 2025).

$$c_0 = \frac{49.62 \frac{kg\,agua}{h}}{2\,822.23 \frac{kg\,totales}{h} / 0.065 \frac{kg\,totales}{m^3}} = \frac{49.62 \frac{kg\,agua}{h}}{43\,418.92 \frac{m^3}{h}} = 0.011 \frac{kg}{m^3}$$

La velocidad superficial del fluido (u_0) se calcula de la siguiente manera:

$$u = \frac{v \left(\frac{\text{m}^3}{\text{h}} \right)}{\text{Sección lecho}} = \frac{43\,418.85 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \frac{1 \text{ h}}{3600}}{\frac{\pi \, 1.60^2}{4}} = 5.99 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

La caída de presión a través del lecho se calcula con la ecuación [I.13]

$$\begin{aligned} \frac{\Delta P}{L} &= \frac{u \, 150 \, \mu \, (1 - \varepsilon)^2}{(D_p^2 \varepsilon^3)} + \frac{1.75 \, \rho \, u^2 (1 - \varepsilon)}{(D_p \varepsilon^3)} = \frac{5.99 \frac{\text{m}}{\text{s}} \, 150 \, 9 \, 10^{-6} \, \text{Pa s} \, (1 - 0.34)^2}{(0.002^2 0.34^3)} + \\ &+ \frac{1.75 \, 700 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \, (5.99 \frac{\text{m}}{\text{s}})^2 (1 - 0.34)}{(0.02 \, 0.34^3)} = 56.8 \frac{\text{kPa}}{\text{m}} \end{aligned}$$



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

SECCIÓN IV:
DISEÑO DEL SISTEMA DE
REACCIÓN PARA LA SÍNTESIS DE
AMONÍACO

por

Fernanda Florencia Leoncini Sánchez

Oviedo, julio de 2025

ÍNDICE

IV.1. INTRODUCCIÓN	248
IV.2. DIAGRAMAS DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	250
IV.3. DISEÑO DEL SISTEMA DE REACCIÓN	253
IV.3.1. DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD	254
IV.3.1.1. Unidad de compresión	254
IV.3.1.2. Unidad de purificación	254
IV.3.1.3. Unidad de reacción	256
IV.3.2. ESTRATEGIA DE DISEÑO Y RESULTADOS OBTENIDOS	257
IV.3.2.1. Etapa de compresión previa a la reacción	257
IV.3.2.2. Unidad de purificación	259
IV.3.2.3. Diseño del reactor	260
IV.3.2.4. Optimización de la masa de catalizador	267
IV.3.2.5. Dimensiones del reactor	269
IV.3.2.6. Refrigeración intermedia	271
IV.3.2.7. Equipos auxiliares	272
IV.4. DISEÑO MECÁNICO	276
IV.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA	279
IV.5.1. EQUIPOS	280
IV.5.1.1. Reactor R-IV.1	280
IV.5.1.2. Compresores	281
IV.5.1.3. Cambiadores de calor	281
IV.5.1.4. Cámara de mezclado	282
IV.5.2. CONSUMIBLES	282
IV.5.2.1. Vapor calefactor	282
IV.5.2.2. Agua de enfriamiento	283
IV.5.2.3. Amoníaco refrigerante	283
IV.5.2.4. Fluido térmico: Dynalene	283
IV.5.2.5. Sustitución de los lechos	283
IV.5.2.6. Electricidad	284

IV.6. BIBLIOGRAFÍA	285
APÉNDICE IV-A: LISTA DE SÍMBOLOS	290
IV-A.1. Símbolos latinos	291
IV-A.2. Símbolos griegos	291
IV-A.3 Nomenclatura propia del código ASME	291
IV-A. 4 ABREVIATURAS	292
APÉNDICE IV-B: TABLAS, GRÁFICAS Y CÁLCULOS ADICIONALES	293
IV.6.1. TABLAS FIGURAS PARA EL CÁLCULO DE PROPIEDADES FÍSICAS	294
IV.6.2. PARÁMETROS DEL CATALIZADOR	295
IV.6.1. TABLAS Y CÁLCULOS PARA LOS EQUIPOS DE TRANSMISIÓN DE CALOR	296
IV.6.1. TABLAS PARA EL DISEÑO MECÁNICO	297
IV.6.1. TABLAS PARA LA ESTIMACIÓN DEL COSTE DE LOS EQUIPOS	298
IV.6.1. CÓDIGO MATLAB PARA LA SIMULACIÓN DEL REACTOR	299

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla IV. I. Balances de materia y energía de la sección IV. Corrientes 16 a 40.3.	252
Tabla IV. II. Balances de materia y energía de la sección IV. Corrientes 40.3 a 56.	252
Tabla IV. III. Condiciones de operación del catalizador en función de la concentración de oxígeno.	255
Tabla IV. IV. Etapas de compresión y refrigeración para la corriente 16.	258
Tabla IV. V. Etapas de compresión y refrigeración para la corriente 40.	258
Tabla IV. VI. Términos y valores de la ecuación de Ergun.	264
Tabla IV. VII. Resultados de la optimización de cada lecho catalítico	269
Tabla IV. VIII. Determinación de la altura total del reactor.	271
Tabla IV. IX. Resultados para el sistema de refrigeración intermedio por generación de vapor HP.	272
Tabla IV. X. Resultados para los equipos de acondicionamiento de las corrientes 40 y 16.	273
Tabla IV. XI. Cambiadores de calor para las etapas de refrigeración intermedia entre compresiones.	273
Tabla IV. XII. Resultados para el cambiador de calor H-IV.12	275
Tabla IV. XIII. Determinación del coste del reactor R-IV.1.	281
Tabla IV. XIV. Determinación del coste de los compresores.	281
Tabla IV. XV. Determinación del coste de los cambiadores de calor.	282
Tabla IV. XVI. Consumo eléctrico de la sección IV.	284
Tabla IV. XVII. Propiedades del fluido térmico Dynalene MS-1 (Dynalene MS-1 Technical Data Sheet).	297

APÉNDICES

Tabla IV-B. I. Coeficientes para el cálculo del factor de efectividad (Dyson y Simon 1968)	294
Tabla IV-B. II. Coeficientes para las expresiones polinómicas de las capacidades caloríficas (Lide et al. 2005)	294
Tabla IV-B. III. Propiedades críticas (Poling, Prausnitz y O'Connell 2020)	294
Tabla IV-B. IV. Coeficientes para el cálculo de la viscosidad (Perry y Green 1999)	294
Tabla IV-B. V. Parámetros del catalizador comercial de Haldar Topsoe (Peters, Max S., Timmerhaus y West 2003)	295
Tabla IV-B. VI. Coeficientes globales para la transmisión de calor en cambiadores de calor de carcasa y tubos (Towler y Sinnott 2008).	296
Tabla IV-B. VII. Selección del acero para el diseño mecánico según el código ASME.	297
Tabla IV-B. VIII. Composición química del acero SA387 (Placa de Aleación ASTM A387 GR.12, Placa, Lámina, Bobina)	297
Tabla IV-B. IX. Flujos molares a la salida de cada lecho catalítico.	304

ÍNDICE DE FIGURAS

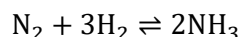
Fig.IV. 1. Diagrama de flujo de la sección IV: Sistema de reacción.	251
Fig.IV. 2. Configuraciones para un sistema de reacción de lecho fijo con refrigeración intermedia (Wilhem Ruppel 2012).	256
Fig.IV. 3. Sistema para de lechos fijos para la eliminación del oxígeno (Ortloff, Graf y Kolb, 2014).	259
Fig.IV.4. Optimización de la cantidad de catalizador necesaria en cada lecho. En línea discontinua se muestra la masa óptima de catalizador.	268
Fig.IV. 5. Representación de cada etapa adiabática con respecto a la conversión del equilibrio.	269
Fig.IV. 6. Configuración del reactor de lecho fijo (Elaboración propia).	270
Fig.IV. 7. Sistema para el soporte del lecho catalítico de la marca Topsoe.	270
Fig.IV. 8. Representación de un cabezal hemisférico (Sinnott 2005).	277

APÉNDICES

Figura IV-B. I. Diagrama generalizado (Elliot et al. 2022)	294
Figura IV-B. II. Simulación del punto de mezcla en el programa Aspen HYSYS,	296
Fig.IV-B. III. Estimación de costes para compresores centrífugos-turbina (Peters, Max Stone, Timmerhaus y West 2003).	298
Figura IV-B. IV. Estimación de costes para cambiadores de calor de carcasa y tubos (Peters, Max Stone, Timmerhaus y West 2003).	298

IV.1. INTRODUCCIÓN

El diseño del reactor para la síntesis de amoníaco representa una etapa crítica dentro del desarrollo del proceso industrial, dado que debe considerar las restricciones termodinámicas y cinéticas impuestas por la naturaleza de la reacción. La síntesis de amoníaco se lleva a cabo mediante el proceso Haber-Bosch, en el cual el nitrógeno y el hidrógeno reaccionan en fase gaseosa para formar amoníaco, en una reacción reversible y fuertemente exotérmica. Dicha reacción se muestra a continuación.

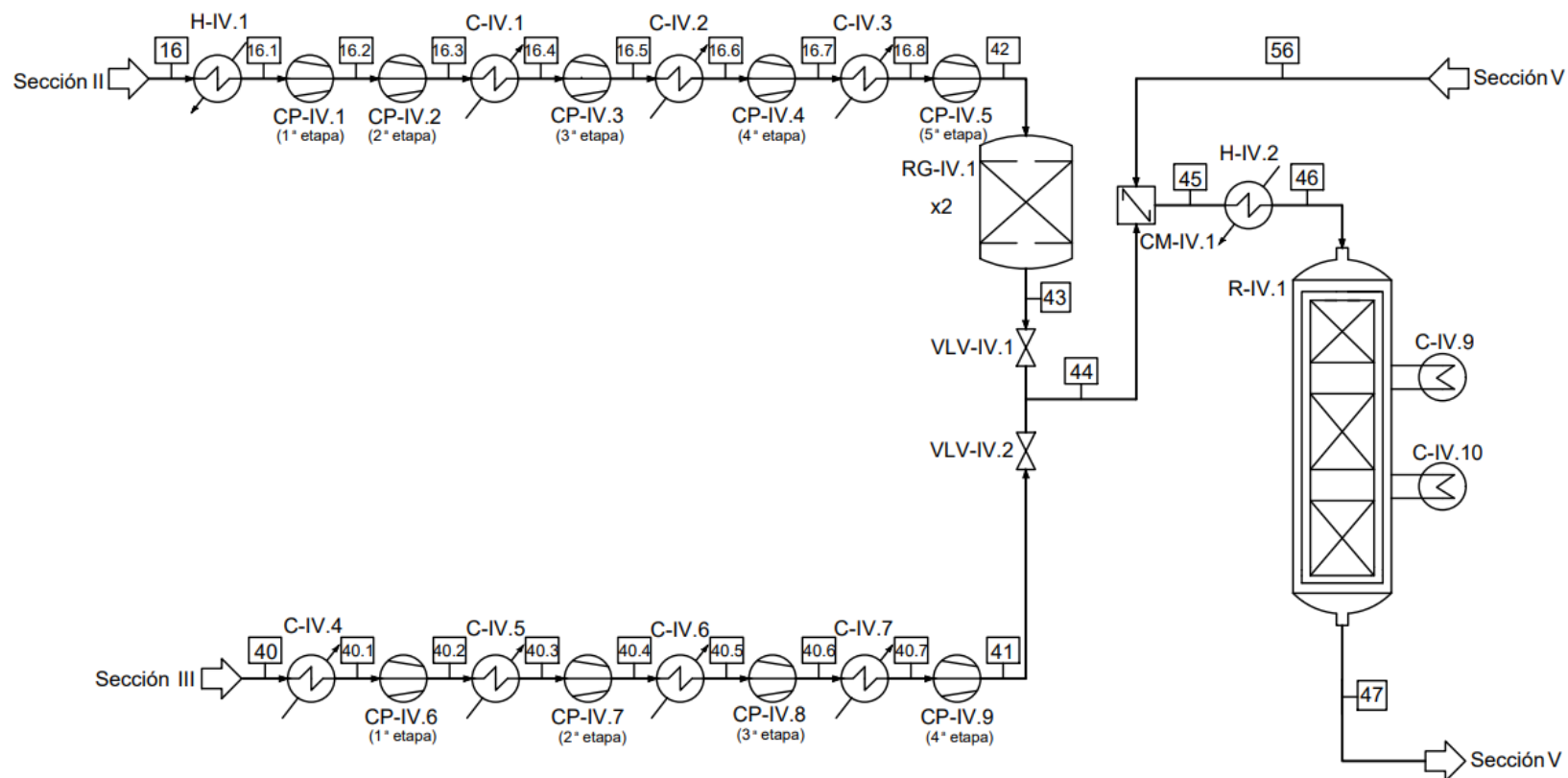


Estas características implican que la conversión por paso estará limitada por el equilibrio. Sin embargo, el producto que se obtiene de la reacción presenta una gran estabilidad y no se producen reacciones secundarias.

Con el fin de maximizar la formación de amoníaco, el diseño del reactor debe buscar un balance adecuado entre temperatura, presión y uso de catalizadores. Altas presiones favorecen la reacción hacia la formación de producto, al reducir el número total de moles en el sistema, de acuerdo con el principio de Le Chatelier. Sin embargo, operar a presiones elevadas implica desafíos significativos de seguridad y mayores costes. En cuanto a la temperatura, si bien valores bajos favorecen el equilibrio hacia los productos, la velocidad de reacción se reduce drásticamente por debajo de los 300 °C, lo que requiere el uso de catalizadores sólidos capaces de aumentar la velocidad de reacción sin condiciones extremas.

El presente diseño busca establecer condiciones de operación que permitan una conversión aceptable sin comprometer la estabilidad del proceso ni la integridad del equipo. Por otro lado, las condiciones de operación que se establezcan deben ser compatibles con el funcionamiento óptimo del catalizador. Se empleará un catalizador de hierro, dado que este tipo de catalizador ha sido el de mayor aplicación durante el desarrollo del proceso Haber-Bosh (Humphreys, Lan y Tao, 2021). La reacción de síntesis de amoníaco en base a este tipo de catalizadores requiere condiciones de alta presión (150-350 atm) y temperatura (350-550 °C), obteniéndose conversiones alrededor de 15-20 % (Boddula y Asiri, 2020).

IV.2. DIAGRAMAS DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA



Síntesis de amoníaco		PLANO Nº 5
Sección IV		 Universidad de Oviedo
Fecha	Autor	
22/07/2025	Fernanda Florencia Leoncini Sánchez	

Fig.IV. 1. Diagrama de flujo de la sección IV: Sistema de reacción.

Tabla IV. I. Balances de materia y energía de la sección IV. Corrientes 16 a 40.3.

Corriente	16	16.1	16.2	16.3	16.4	16.5	16.6	16.7	16.8	40	40.1	40.2	40.3
Flujo másico (kg/h)													
Nitrógeno	12 844	12 844	12 844	12 844	12 844	12 844	12 844	12 844	12 844	-	-	-	-
Hidrógeno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2 773	2 773	2 773	2 773
Amoniaco	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Argón	5	5	5	5	5	5	5	5	5	-	-	-	-
Oxígeno 10 ³	634	634	634	634	634	634	634	634	634	-	-	-	-
TOTAL	12 850	12 850	12 850	12 850	12 850	12 850	12 850	12 850	12 850	2 773	2 773	2 773	2 773
T (°C)	-194	-100	-40	42	25	129	50	163	100	50	25	99	60
H (kJ/kg)	203	105	42	445	26	140	54	182	113	720	354	1 410	852
P (kPa)	122	122	334	942	942	2 614	2 614	7 285	7 285	993	993	2 087	2 087

Tabla IV. II. Balances de materia y energía de la sección IV. Corrientes 40.3 a 56.

Corriente	40.4	40.5	40.6	40.7	41	42	43	44	45	46	47	56
Flujo másico (kg/h)												
Nitrógeno	-	-	-	-	-	12 844	12 844	12 844	62 430	62 430	49 694	49 586
Hidrógeno	2 773	2 773	2773	2773	2773	-	-	2 773	13 303	13 303	10 553	10 530
Amoniaco	-	-	-	-	-	-	-	-	1 423	1 423	16 908	1 423
Argón	-	-	-	-	-	5	5	5	158	158	158	153
Oxígeno 10 ³	-	-	-	-	-	640	1	1	1	1	1	1
TOTAL	2 773	2 773	2 773	2 773	2 773	12 850	12 849	15 622	77 313	77 313	77 314	61 692
T (°C)	143	90	180	130	230	230	230	230	205	400	418	200
H (kJ/kg)	2 043	1 285	2 591	1 864	3 344	260	260	810	714	1 403	1 462	610
P (kPa)	4 448	4 448	9 494	9 494	20 265	20 265	20 265	20 265	20 265	20 265	20 229	20 265

IV.3. DISEÑO DEL SISTEMA DE REACCIÓN

IV.3.1. DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD

IV.3.1.1. Unidad de compresión

Previo al proceso de síntesis de amoníaco, las corrientes gaseosas correspondientes a los reactivos deben ser comprimidas hasta las condiciones de operación en el interior del reactor. Generalmente en las plantas de producción de amoníaco, lo más habitual es el uso de compresores centrífugos (Max Appl, 2012).

Las condiciones de presión que se han fijado para el reactor se corresponden con 200 atm, lo cual se ha establecido en base a las condiciones de operación del catalizador seleccionado (87- 581 atm).

Para alcanzar esta presión en las corrientes de hidrógeno y nitrógeno provenientes de operaciones previas en el proceso, se debe realizar una serie de etapas de compresión. Es importante tener en cuenta que las dos corrientes difieren en condiciones de presión y temperatura, por tanto, para llevar a cabo su mezcla, se igualan en condiciones para lograr que la mezcla se vea favorecida termodinámicamente.

Finalmente, en la selección del compresor que cumpla con los requerimientos del proceso, es de suma importancia optar por un compresor industrial exento de aceite, ya que los constituyentes de este podrían suponer un envenenamiento permanente del catalizador.

IV.3.1.2. Unidad de purificación

Posterior a la etapa de compresión, se requiere un proceso de purificación final para la corriente proveniente de la sección II, esto se debe a que esta corriente contiene trazas de oxígeno, el cual constituye un veneno temporal para el catalizador seleccionado.

Para la selección del catalizador se ha elegido el KM1R de la marca TOPSOE, un producto comercial ampliamente utilizado en la síntesis de amoníaco. Esta elección se ha basado en un estudio de mercado de los principales proveedores especializados en este tipo de catalizadores. Actualmente, más de la mitad de la producción mundial de amoníaco se realiza con catalizadores KM1 o KM1R (Topsoe, 2025)

Este catalizador se compone principalmente de hierro y óxido de hierro (89–93 % en peso), con el resto constituido por promotores como K_2O , Al_2O_3 , CaO y SiO_2 (7–11 % en peso). Su alta actividad y estabilidad permiten una vida útil alrededor de 10-15 años operando en condiciones óptimas, por lo tanto, es de suma importancia que la corriente de entrada al

reactor no contenga compuestos como CO₂, CO, H₂O y O₂, que podrían disminuir su actividad catalítica. Debido a la alta eficacia del proceso de pretratamiento del aire descrito en la sección I, se puede considerar que el único componente de esta corriente que podría envenenar el catalizador será el oxígeno.

Las partículas del catalizador KM1R vienen en distintos tamaños, sin embargo, las reglas heurísticas establecen que el tamaño de partícula para reactores de lecho fijo debe estar comprendido entre 2-5 mm (Couper, et al. 2012). Al tratarse de un reactor de flujo axial, lo más adecuado son partículas de 5 mm. En cuanto a la forma de las partículas, según las especificaciones del fabricante, se trata de un sólido irregular.

Para solucionar esto, en base a resultados experimentales obtenidos para el catalizador seleccionado, se ha determinado que una solución eficaz es el uso de un reactor de guardia (Jan Folke et al. 2020).

En base a estudios realizados a escala de laboratorio, se determinó que con este método es posible reducir los niveles de O₂ a concentraciones por debajo de las 100 ppt (Jan Folke et al. 2020).

En base a esto, se ha optado por introducir un sistema capaz reducir el de oxígeno hasta concentraciones alrededor de 0.1 ppm.

La corriente a tratar posee una concentración de 30 ppm de oxígeno. El informe técnico proporcionado por el proveedor del catalizador aporta la siguiente expresión que permite calcular la concentración de oxígeno equivalente.

$$\text{ppm O eqv} = 2(\text{ppm O}_2) + 2(\text{ppm CO}_2) + (\text{ppm CO}) + (\text{ppm H}_2\text{O}) \quad [\text{IV.1}]$$

En la Tabla IV-III. se muestran las condiciones de operación del catalizador en función de las ppm O eqv.

Tabla IV. III. Condiciones de operación del catalizador en función de la concentración de oxígeno.

ppm O eqv.	Condiciones de operación
0-2	Ideal
2-4	Operación continua por unos meses
4-6	Operación continua por unas semanas
6-10	Operación continua por unos días

Dado que el único contaminante presente en la corriente de entrada al reactor es el oxígeno, en base a la Ecuación IV.1 se puede determinar que una concentración de 1 ppm de oxígeno es el máximo valor admisible para considerar unas condiciones óptimas de operación.

IV.3.1.3. Unidad de reacción

El sistema de reacción para la síntesis de amoníaco está constituido por un reactor catalítico, siendo numerosas las posibles configuraciones por las que se puede optar, ya sea un reactor multitubular o un reactor de lecho fijo.

Para este trabajo se ha optado por el diseño de un reactor de lecho fijo, debido a que esta configuración supone una mayor eficacia en cuanto a maximizar la conversión y menores costes de inversión debido a su sencillo diseño (Weel et al., 2024).

La reacción de síntesis de amoníaco es fuertemente exotérmica, por tanto, uno de los principales aspectos diferenciadores en la configuración seleccionada es el sistema de refrigeración. Es posible llevar a cabo la reacción con intercambio de calor, lo que permite retirar la energía desprendida por la reacción para mantener la temperatura en un intervalo adecuado para la operación. Otra alternativa es llevar a cabo la reacción por etapas adiabáticas, de tal forma que la energía desprendida pueda ser retirada mediante refrigeración intermedia. Para las características de la reacción estudiada, la forma más conveniente de operar es según la segunda alternativa planteada, puesto que permite que la reacción se desarrolle próxima a la progresión óptima de temperaturas del sistema. A continuación, en la Figura IV.2. se muestran las posibles configuraciones para el sistema de reacción seleccionado.

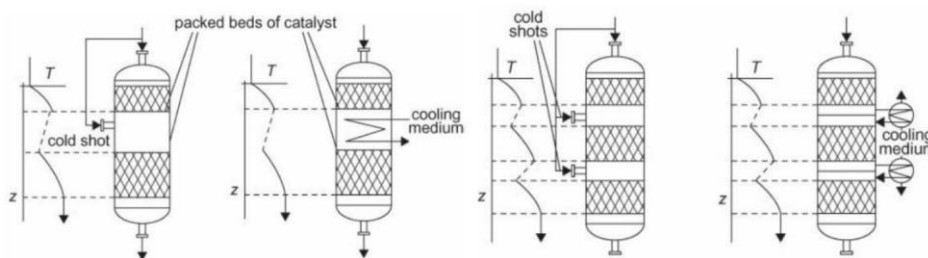


Fig.IV. 2. Configuraciones para un sistema de reacción de lecho fijo con refrigeración intermedia (Wilhem Ruppel 2012).

En el diseño de reactores de lecho fijo por etapas, la refrigeración intermedia puede realizarse mediante refrigeración indirecta o inyección de alimentación fría. Se ha descartado el uso de la propia alimentación por medio de inyección fría como medio de enfriamiento, ya

que diluye el gas parcialmente convertido, reduce la eficiencia del proceso y complica el control operativo. Por estas razones, esta alternativa se considera la menos adecuada para la síntesis de amoníaco (Khademi y Sabbaghi, 2017).

En cuanto al diseño del reactor con un sistema de refrigeración indirecta, esto proporciona las ventajas de un sistema de intercambio de calor más flexible e independiente, lo que permite que en cada etapa se pueda operar en un intervalo de temperatura óptimo. Por otro lado, implementar cambiadores de calor externos facilita el mantenimiento del sistema y favorece el desarrollo de una integración energética.

Teniendo en cuenta todos los criterios mencionados anteriormente, se procederá con el diseño de un reactor constituido por tres lechos fijos, que operan de forma adiabática y con sistema de refrigeración indirecta entre lechos, ya que esta se encuentra entre las configuraciones más favorables para la síntesis de amoníaco (Khademi y Sabbaghi, 2017)

Para la refrigeración intermedia se optará por un sistema de generación de vapor de alta presión, siendo esta una estrategia implementada en plantas modernas de amoníaco, lo que permite una alta eficacia energética (Max Appl, 2012).

Para cada uno de los lechos se llevará a cabo la optimización de la cantidad de masa de catalizador requerida para alcanzar una conversión óptima sin que esta supere los límites termodinámicos.

IV.3.2. ESTRATEGIA DE DISEÑO Y RESULTADOS OBTENIDOS

IV.3.2.1. Etapa de compresión previa a la reacción

Para obtener las corrientes de los reactivos en las condiciones de operación, es necesario realizar una serie de etapas de compresión. Cada etapa consiste en una compresión adiabática seguida de una refrigeración intermedia. Los cálculos correspondientes son similares a los descritos en la sección I, aunque se requiere un mayor número de etapas debido a la alta presión de operación del reactor (200 atm).

Se realizará una serie de compresiones en paralelo para cada una de las corrientes de reactivo procedentes de las secciones anteriores, el número de etapas para alcanzar la presión final será diferente en cada caso debido a la discrepancia en condiciones iniciales.

La corriente 16 de la sección II se debe comprimir desde 1.2 atm y -194 °C, condiciones en las que el nitrógeno está próximo a condensar, esto implica que será conveniente calentar esta corriente antes de someterla a compresión para evitar inconvenientes con los equipos, además, esto evitará el uso de equipos especializados que soporten esas temperaturas. Los cálculos correspondientes a este calentamiento están descritos en la sección de equipos auxiliares.

Siguiendo con las reglas heurísticas, se establece que para gases diatómico se debe mantener una relación de compresión alrededor de 4 y mantener la misma relación de compresión en cada etapa (Couper, et al. 2012), de tal forma que aplicando la Ecuación I.10 se obtiene el número de etapas para cada corriente, siendo 5 etapas para la corriente 16 y 4 etapas para la corriente 40. A continuación, la Tabla IV.IV. y la Tabla IV.V contienen los resultados obtenidos.

El cálculo de la potencia en cada compresión se ha realizado a partir de la I.18 y teniendo en el flujo en cada corriente se obtiene la potencia para cada etapa de compresión.

Tabla IV. IV. Etapas de compresión y refrigeración para la corriente 16.

Etapas	Presión (atm)	Temperatura salida (°C)	Potencia (kW)	Equipo
1	3.3	-40	158.9	CP-IV.1
2	9.3	42	217.1	CP-IV.2
2.1	9.3	25	-	C-IV.1
3	25.8	129.1	275.7	CP-IV.3
3.1	25.8	50	-	C-IV.2
4	71.9	162.8	298.7	CP-IV.4
4.1	71.9	100	-	C-IV.3
5	200	230.3	345.0	CP-IV.5

Tabla IV. V. Etapas de compresión y refrigeración para la corriente 40.

Etapas	Presión (atm)	Temperatura salida (°C)	Potencia (kW)	Equipo
1	20.6	97.1	572.3	CP-IV.6
1.1	20.6	60	-	C-IV.5
2	43.9	140.5	639.5	CP-IV.7
2.2	43.9	90	-	C-IV.6
3	93.7	177.8	697.1	CP-IV.8
3.3	93.7	130	-	C-IV.7
4	200	227.5	774.0	CP-IV.9

IV.3.2.2. Unidad de purificación

Como se ha mencionado anteriormente, para llevar a cabo una purificación final de la corriente proveniente de la sección II, es necesario la implementación de un reactor de guardia.

El equipo consistirá en un reactor de lecho fijo que contendrá un compuesto capaz de reaccionar con el oxígeno formando un óxido metálico. Se ha optado por un lecho constituido por Cu ya que en intervalo de temperatura que se encuentran las corrientes gaseosas a la salida de la etapa de compresión, es adecuado para llevar a cabo esta reacción. La temperatura mínima de operación son 150 °C y la temperatura máxima es 250 °C (Ortloff, Graf y Kolb, 2014).

Se requiere la implementación de dos lechos fijos para lograr una purificación continua y eficiente durante el proceso. Mientras uno opera, el otro se regenera mediante una corriente de hidrógeno.

En la Figura IV.3. se muestra el sistema que constituye la unidad de purificación.

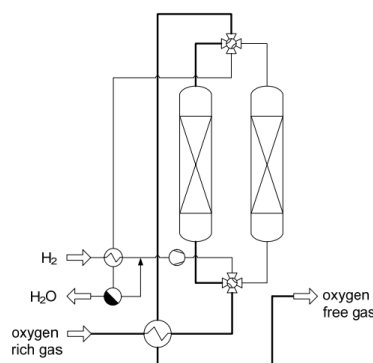
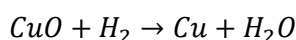
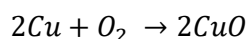


Fig.IV. 3. Sistema para de lechos fijos para la eliminación del oxígeno (Ortloff, Graf y Kolb, 2014).

El fundamento del equipo se basa en las siguientes reacciones:



La alternativa más conveniente para esta operación son los lechos de cobre de la marca Hunan Xintan, especializados en la eliminación de oxígeno en corrientes de nitrógeno. Se trata de partículas cilíndricas compuestas por una alta proporción de óxido de cobre (CuO) y óxidos metálicos inertes. El tiempo de vida útil es de 5 años en condiciones de operación adecuadas (CuO catalyst (for removing oxygen from Nitrogen)-Hunan Xintan New Material CO.,Ltd).

El objetivo de esta sección no constituye abordar el diseño de este equipo y a falta información suficiente para llevar a cabo los cálculos correspondientes, se considerará la inclusión de este equipo para asegurar que las condiciones de operación para el catalizador con las óptimas.

En base a resultados bibliográficos, se asume que el equipo será capaz de reducir la concentración de oxígeno hasta 0.1 ppm (Jan Folke et al., 2020), de tal forma que considerando la recirculación, la concentración de oxígeno introducida en el reactor se corresponde con 1 ppm, lo que permite operar en condiciones ideales en base a lo que se muestra en la Tabla IV.III.

IV.3.2.3. Diseño del reactor

La reacción química correspondiente a la obtención de amoníaco tiene una cinética catalítica heterogénea. Para esta cinética se han realizado una gran cantidad de estudios con el objetivo de determinar un modelo que permita predecir el comportamiento de los fenómenos que ocurren durante dicha reacción. Entre estos los de mayor relevancia se corresponden con los modelos cinéticos desarrollados por Temkin y Pyzhev, Langmuire-Hinshelwood y Ozaki. Para el desarrollo del presente trabajo se tendrá en cuenta el modelo desarrollado por Temkin y Pyzhev, por ser el de mayor aplicación industrial (El-Shafie, 2023).

Se puede considerar que la reacción está constituida por las siguientes etapas:

1. La adsorción disociativa de N_2 .
2. La reacción superficial de las especies adsorbidas.
3. La desorción del amoníaco que se encuentra adsorbido.

El modelo desarrollado por Temkin y Pyzhev se basa en el empleo de un catalizador de hierro y asumiendo la adsorción disociativa del nitrógeno como la etapa controlante del proceso (D. Annable, 1952). Estudios posteriores han realizado modificaciones sobre este modelo, destacándose la ecuación desarrollada por (Dyson y Simon 1968) lo que da lugar a la siguiente expresión matemática que representa la velocidad de formación del amoníaco.

$$r_{NH_3} = 2k_2 \left[K_a^2 f_{N_2} \left(\frac{f_{H_2}^3}{f_{NH_3}^2} \right)^\alpha - \left(\frac{f_{NH_3}^2}{f_{H_2}^3} \right)^{1-\alpha} \right] \quad [IV.2]$$

Siendo k_2 la constante cinética de la reacción inversa, α una constante que toma valores entre 0.5 y 0.8 según sea la adsorción de nitrógeno, K_a la constante de equilibrio termodinámico y f_i se corresponde con la fugacidad de cada uno de los compuestos.

Esta ecuación permite modelizar el comportamiento del sistema en condiciones de alta presión, por lo que resulta válido entre 150-300 atm y 400-500 °C. El valor para el parámetro cinético α que ha proporcionado resultados consistentes al ser comparado con datos experimentales se corresponde con 0.50 (Dyson y Simon, 1968), por lo que se considerará este valor en los cálculos posteriores.

Como se puede observar en la Ecuación IV.2, esta expresión tiene en cuenta el comportamiento no ideal del sistema, por tanto, será necesario acudir a modelos termodinámicos que permitan determinar las fugacidades de cada uno de los compuestos, la composición, temperatura y presión de la mezcla.

En primer lugar, para la determinación de la constante de equilibrio, se empleará la siguiente ecuación (Gillespie y Beattie, 1930).

$$\log_{10} K_a = -2.69 \log_{10} T - 5.52 \cdot 10^{-5} + 1.85 \cdot 10^{-7} T^2 + \frac{2001.6}{T} + 2.69 \quad [\text{IV.3}]$$

Donde T se corresponde con la temperatura del sistema y se expresa en Kelvin. En cuanto a la constante de equilibrio referente a las actividades de los compuestos, se podrá relacionar con la presión del sistema tal como se indica a continuación.

Las fugacidades pueden expresarse de la siguiente forma (Gutiérrez Martín, 2020).

$$f_i = \varphi_i y_i P \quad [\text{IV.4}]$$

Siendo f_i la fugacidad del compuesto i referido a las condiciones de equilibrio a un estado particular de referencia, y_i representa la fracción molar del compuesto i, P es la presión del sistema y φ_i el coeficiente de fugacidad del compuesto i y es función de la temperatura, la presión y la composición. Los coeficientes de fugacidad podrán ser calculado para cada uno de los compuestos, mediante las siguientes expresiones planteadas por Cooper (1967) y Shaw y Wones (1964).

$$\varphi_{N_2} = 0.93 + 0.310 \cdot 10^{-3} T + 0.29 \cdot 10^{-3} P - 0.27 \cdot 10^{-6} T^2 + 0.48 \cdot 10^{-6} P^2 \quad [\text{IV.5}]$$

$$\varphi_{H_2} = e^{\left\{ e^{(-3.84 T^{0.13} + 0.54) P} - e^{(-0.13 T^{0.5} - 15.98) P^2 + 300 [e^{(-0.012 T - 5.94)}] \left(e^{\frac{P}{300}} - 1 \right)} \right\}} \quad [\text{IV.6}]$$

$$\varphi_{NH_3} = 0.14 + 0.20 \cdot 10^{-2} T - 0.45 \cdot 10^{-3} P - 0.11 \cdot 10^{-5} T^2 + 0.28 \cdot 10^{-6} P^2 \quad [\text{IV.7}]$$

En las expresiones indicadas anteriormente, la temperatura se expresa en Kelvin. Mientras que P refiere a la presión total de sistema estudiado y se expresa en atmósferas.

Las fracciones molares de cada compuesto se indican en función del flujo molar y la conversión de la siguiente forma:

$$y_{N_2} = \frac{F_{N_2 0} (1 - X_{N_2})}{F_{Total 0} - 2F_{N_2 0} X_{N_2}} \quad [IV.8]$$

$$y_{H_2} = \frac{F_{H_2 0} - 3F_{N_2 0} X_{N_2}}{F_{Total 0} - 2F_{N_2 0} X_{N_2}} \quad [IV.9]$$

$$y_{NH_3} = \frac{F_{NH_3 0} + 2F_{N_2 0} X_{N_2}}{F_{Total 0} - 2F_{N_2 0} X_{N_2}} \quad [IV.10]$$

Donde:

y_i : fracción molar del compuesto i.

F_{i0} : flujo del compuesto i a la entrada del reactor, kmol/h.

$F_{Total 0}$: flujo molar total a la entrada del reactor, kmol/h.

Con respecto a la constante cinética de la reacción inversa, se considera una dependencia con la temperatura consistente con la ecuación de Arrhenius. Para el diseño del reactor, se emplearon los parámetros cinéticos determinados experimentalmente por Dyson y Simon (1968).

$$k_2 = A_0 e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad [IV.11]$$

Donde:

A_0 : factor pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius, $A = 8.849 \cdot 10^{14}$ kmol NH_3 /hm³

E_a : energía de activación, $E_a = 1.705 \cdot 10^5$ kJ/kmol.

R : constante de los gases ideales, kJ/kmol K

Otro factor que se debe tener en cuenta es que la expresión que se muestra en la Ecuación VI.2 es válida en situaciones donde no hay restricciones por difusión, como ocurre en la caso de partículas finas. Sin embargo, para partículas de catalizador de tamaño industrial (6 a 10 mm), que se encuentran sujetas a difusión en su estructura porosa, la velocidad de reacción se corrige multiplicando por un factor de efectividad. Este valor permite cuantificar la disminución en la velocidad de reacción dentro de la partícula debido a las limitaciones de transporte. (Dyson y Simon 1968) han desarrollado una expresión que permite calcular este factor en función de la conversión y la temperatura para diferentes presiones.

$$\eta = b_0 + b_1 T + b_2 X_{N_2} + b_3 T^2 + b_4 X_{N_2}^2 + b_5 T^3 + b_6 X_{N_2}^3 \quad [IV.12]$$

Donde η se corresponde con el factor de efectividad, b_i son coeficientes que dependen de la presión, cuyos valores se muestran en la Tabla IV-B. I del anexo (se ha empleado los valores correspondientes a 225 atm, siendo el valor más próximo a las condiciones de operación) y X_{N_2} se corresponde con la conversión referida al reactivo limitante.

Para llevar a cabo el diseño del reactor, se requiere la obtención de expresiones que permitan relacionar la conversión, la temperatura y la presión con la masa de catalizador, para ello se deben realizar los correspondientes balancees de materia y energía teniendo en cuenta las siguientes suposiciones que permiten la modelización del sistema:

1. Se considera que el flujo a través del reactor se realiza únicamente según la coordenada axial.
2. El reactor opera en estado estacionario.
3. La temperatura del gas reactante a través del lecho es igual a la de las partículas del catalizador para cada posición, considerándose un modelo pseudo-homogéneo.
4. Los gradientes térmicos y de concentración en la dirección radial se consideran despreciables.
5. El reactor opera bajo condiciones adiabáticas.

Teniendo en cuenta todas las suposiciones indicadas anteriormente, se procede a plantear los balances de materia y energía considerando un elemento diferencial de masa de catalizador, de tal forma que se obtiene la siguientes expresión.

$$\frac{dX_{N_2}}{dW} = \frac{\eta(r_{NH_3})_w}{2F_{N_2 0}} \quad [IV.13]$$

Donde:

X_{N_2} : conversión de nitrógeno.

W : masa de catalizador, kg.

$F_{N_2 0}$: flujo molar de nitrógeno a la entrada del reactor, kmol/h.

$(-r_{NH_3})_w$: velocidad de reacción intrínseca por masa de catalizador, kmol/h kg cat.

η : factor de efectividad.

Del mismo modo se procede a plantear el balance de energía obteniéndose la expresión que se muestra a continuación.

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\eta(r_{NH_3})_w(-\Delta H_r)}{\sum F_i C p_i} \quad [IV.14]$$

Donde:

T: temperatura del sistema, K.

F_i : flujo molar del compuesto i, kmol/h.

ΔH_r : entalpía de reacción, kJ/kmol NH_3

C_{pi} : capacidad calorífica del compuesto i, kJ,kmol.

Para calcular la entalpía de la reacción de síntesis de amoníaco se emplea la expresión desarrollada por Strelzoff (1 981).

$$\Delta H_R = 4.18 \left\{ - \left[0.54 + \frac{840.6}{T} + \frac{459.7 \cdot 10^6}{T^3} \right] P - 5.4T - 0.3 \cdot 10^{-3} T^2 + 1.7 \cdot 10^{-6} T^3 - 9157.1 \right\} \quad [\text{IV.15}]$$

Donde P es la presión del sistema , T es la temperatura absoluta y ΔH_R la entalpía de reacción.

Para el cálculo de las capacidades caloríficas se han empleado una expresión polinómica del tipo:

$$C_p = a + bT + cT^2 \quad [\text{IV.16}]$$

Donde los coeficientes a, b y c se encuentran indicados para cada uno de los compuestos en la Tabla IV-B.II del apéndice B.

Finalmente, para el balance de cantidad de movimiento se emplea la ecuación de Ergun en función de la masa de catalizador (Fogler, 2001).

$$\frac{dP}{dW} = - \frac{GTP_0(1-\phi)(1+\varepsilon X_{N_2})}{\rho_b A_c \rho_0 T_0 P \phi^3} \left[\frac{150(1-\phi)\mu}{D_p} + 1.75G \right] \quad [\text{IV.17}]$$

La Tabla IV.VI. indica el significado de cada una de las variables, su valor y sus respectivas unidades.

Tabla IV. VI. Términos y valores de la ecuación de Ergun.

Símbolo	Significado	Unidades	Valor
P_0	Presión inicial	Pa	$2.026 \cdot 10^7$
T_0	Temperatura inicial	K	673
Φ	Porosidad del lecho	Adim.	0.55
ε	Factor de expansión	Adim.	$\varepsilon = y_{N_2} \delta$
ρ_b	Densidad del lecho	kg/m ³	2800
ρ_0	Densidad inicial de la mezcla gaseosa	kg/m ³	$\rho_0 = \frac{PM_m}{RTZ}$
A_c	Área de sección transversal	m ²	$A_c = \frac{\pi}{4} D^2$
D_p	Diámetro de las partículas de lecho	m	0.005
μ	Viscosidad del gas que atraviesa el lecho	Pa s	-
G	Masa velocidad superficial	kg/m ² s	$G = \frac{\sum F_i M_i}{A_c}$

En el cálculo de la caída de presión a través del lecho, se deben estimar cada una de las propiedades físicas de la de la mezcla gaseosa.

Para considerar la variación de la densidad del gas reaccionante, debido a las elevadas temperaturas y presiones que implican la síntesis de amoníaco, no se puede realizar una aplicación directa de la ley de los gases ideales, sin embargo esto se puede corregir introduciendo el factor de compresibilidad Z (Nielsen, 1995), obteniéndose la siguiente expresión.

$$\rho_m = \frac{PM_m}{RTZ} \quad [IV.18]$$

Donde ρ_m representa la densidad de la mezcla gaseosa, M_m el peso molecular de la mezcla, el R la constante de los gases ideales, Z el factor de compresibilidad, P y T la presión y temperatura del sistema respectivamente.

El factor de compresibilidad es estimado a partir del Principio de los Estados Correspondientes, donde dicho factor es función de las coordenadas relativas al punto crítico.

$$Z = f(Z_c, T_R, P_R) \quad [IV.19]$$

Donde Z_c es una propiedad crítica para las sustancias, T_R la temperatura reducida y P_R la presión reducida. Las coordenadas reducidas se obtienen a partir de las propiedades críticas para cada compuesto y se calculan de la siguiente forma:

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad [IV.20]$$

$$P_R = \frac{P}{P_c} \quad [IV.21]$$

Donde T_c y P_c son la temperatura y presión crítica, las cuales se encuentran tabuladas para cada compuesto en la Tabla IV-B.III del apéndice.

Al realizar los cálculos correspondientes, se pudo comprobar que el factor de compresibilidad en las condiciones de operación presenta una leve variación. A efectos de simplificar los cálculos, se ha considerado un valor de Z obtenido para la temperatura y presión media (entre la entrada y salida a cada lecho catalítico) y considerando la contribución del nitrógeno, hidrógeno y amoníaco ya que son los compuestos mayoritarios.

El cálculo de la viscosidad de cada uno de los compuestos se realiza mediante la siguiente correlación que expresa su variación con respecto a la temperatura (Perry y Green, 1999).

$$\mu = \frac{AT^B}{\left(1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}\right)} \quad [\text{IV.22}]$$

Donde A, B, C y D son coeficientes tabulados para cada uno de los compuestos, cuyos valores se reúnen en la Tabla IV-B.IV del apéndice. Con la intención de simplificar los cálculos y teniendo en cuenta que la viscosidad no presenta una variación significativa con la temperatura con respecto a otras propiedades físicas, se considerará únicamente la viscosidad de los compuestos: nitrógeno, hidrógeno y amoníaco, ya que son los compuestos mayoritarios en la mezcla gaseosa.

Para estimar la viscosidad de la mezcla gaseosa, el modelo más adecuado es la ecuación de Wilke (Nielsen, 1995). A pesar de que esta ecuación es empleada para el cálculo de la viscosidad de mezclas gaseosas a baja presión, se usará en este caso para hacer una estimación de cómo evoluciona la viscosidad del sistema con la temperatura.

$$\mu_m = \sum_{i=1}^n \frac{y_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n y_j \phi_{ij}} \quad [\text{IV.23}]$$

Donde μ_m se corresponde con la viscosidad de la mezcla gaseosa, μ_i es la viscosidad de cada compuesto en función de la temperatura, calculada mediante la Ecuación IV.22, y_i - y_j son las fracciones molares de las especies ij y ϕ_{ij} es un número adimensional que se calcula mediante la siguiente expresión.

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2 \quad [\text{IV.24}]$$

Siendo M_i y M_j los pesos moleculares de las especies i y j respectivamente.

Para determinar la longitud requerida de cada una de las etapas de reacción, se emplea la siguiente expresión que permite relacionar la longitud de cada lecho con respecto a la masa de catalizador requerida.

$$\frac{dL}{dW} = \frac{1}{\rho_b \pi r^2} \quad [\text{IV.25}]$$

Donde L es la longitud de cada lecho, W la masa de catalizador, r el radio interno del reactor y ρ_b la densidad del lecho. La Ecuación IV.25 permite determinar, una vez fijada una de las dimensiones del reactor, conocer las restantes.

Dado que el reactor diseñado opera según un flujo axial, la variable característica en cada etapa de reacción será la longitud de cada lecho. Por lo tanto, se ha optado por fijar un

valor para el radio interno del reactor (y, en consecuencia, su diámetro), de modo que se cumplan las relaciones dimensionales establecidas por reglas heurísticas, las cuales serán referenciadas junto con los resultados obtenidos.

Una vez planteado el conjunto de ecuaciones necesarias para la modelización del sistema, se procede al desarrollo de un código en MATLAB que permita resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden mediante el método de Euler. Este método ha sido seleccionado por su simplicidad y por su capacidad de proporcionar una solución aproximada de forma rápida y directa.

La resolución del sistema mediante el método de Euler se lleva a cabo variando la masa de catalizador, que constituye la variable independiente del sistema, en incrementos de 0.5 kg. De esta forma, se puede analizar la evolución de las variables dependientes: conversión, temperatura, presión y longitud del lecho.

El código desarrollado se encuentra en la sección Apéndice-B, donde se describe detalladamente el procedimiento seguido. Este consiste en la combinación de un bucle *for* con una estructura condicional *if*, lo que permite realizar múltiples iteraciones hasta alcanzar las condiciones óptimas. El código ha sido implementado para los tres lechos, ajustando las condiciones iniciales según corresponda.

IV.3.2.4. Optimización de la masa de catalizador

Con el objetivo de optimizar la cantidad de catalizador requerida en cada lecho, se ha una representación de la conversión frente a masa de catalizador, la cual se muestra en la Figura IV.4.

La selección de la cantidad óptima de catalizador en los tres lechos se justifica en base a la selección del punto donde la pendiente de la curva disminuye significativamente, lo que indica que incrementar la masa de catalizador no justifica el costo adicional frente al pequeño incremento en conversión.

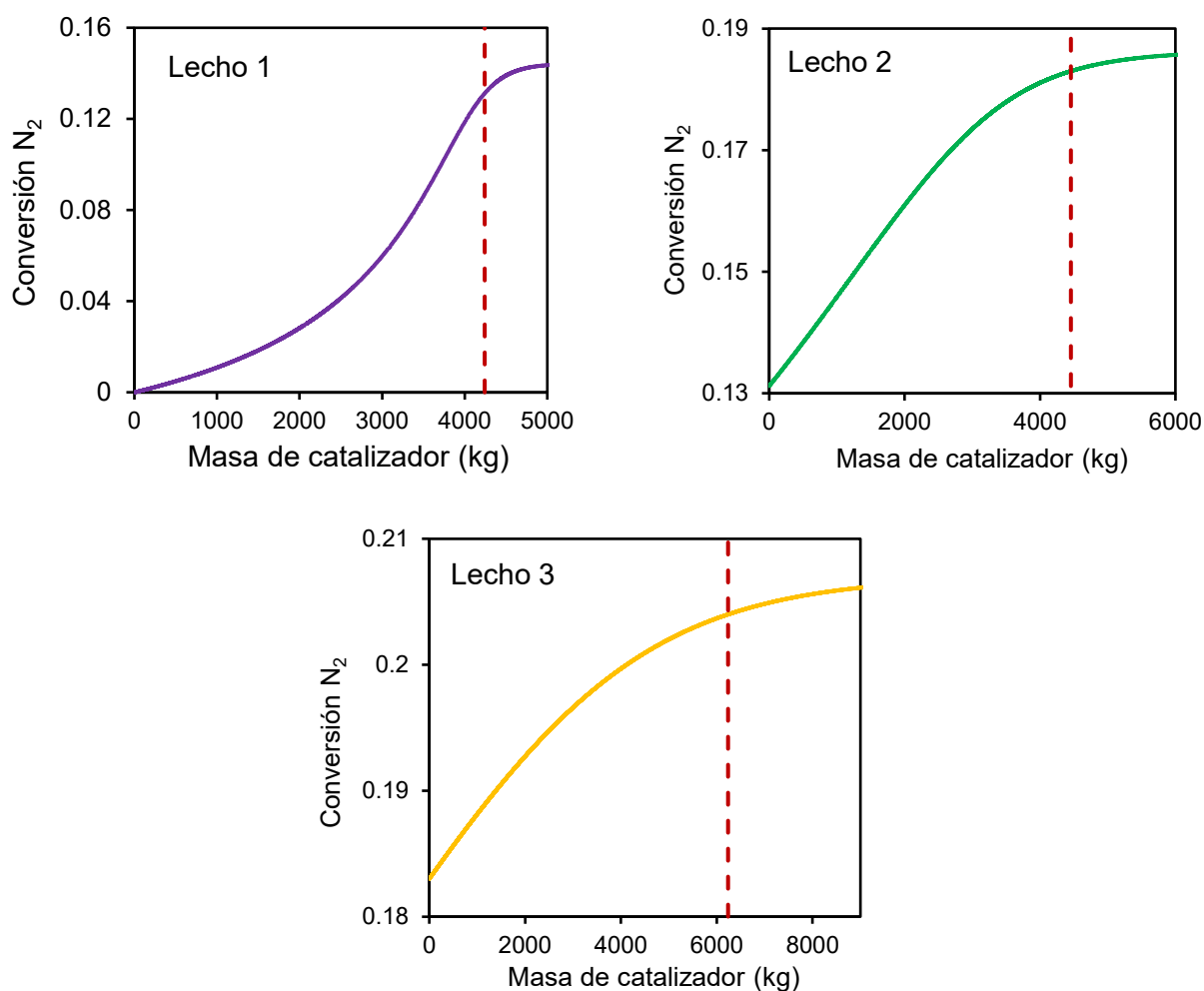


Fig.IV.4. Optimización de la cantidad de catalizador necesaria en cada lecho. En línea discontinua se muestra la masa óptima de catalizador.

Se puede comprobar en la Figura IV.4. que inicialmente al aumentar la cantidad de masa de catalizador, se produce un aumento en la conversión de la reacción, debido a que las condiciones propician la reacción directa. Sin embargo, según transcurre la reacción, la temperatura aumenta considerablemente, desplazando el equilibrio de la reacción en el sentido inverso, lo que empieza a limitar la formación de amoníaco. En estas condiciones, se comprueba que un aumento adicional en la masa de catalizador no se traduce en una mejora significativa en la conversión.

Se ha determinado que es necesario una masa total de catalizador de 14 956 kg.

En la Figura IV.5. se representan las etapas de reacción con respecto a la conversión del equilibrio.

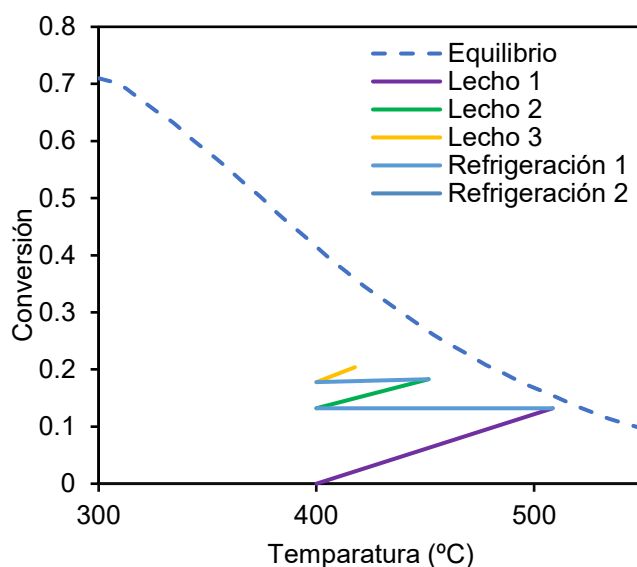


Fig.IV. 5. Representación de cada etapa adiabática con respecto a la conversión del equilibrio.

El cálculo de la conversión del equilibrio se ha realizado a partir de la Ecuación IV.26 (Nielsen, 1995), relacionando las fracciones molares de cada compuesto con la conversión mediante la Ecuación IV.8-10.

$$\frac{(\varphi_{NH_3} y_{NH_3})^2}{(\varphi_{N_2} y_{N_2})(\varphi_{H_2} y_{H_2})^3} = PK_a \quad [IV.26]$$

Los resultados para la resolución del sistema para cada uno de los lechos son los que se muestran en la Tabla IV.II.

Tabla IV. VII.Resultados de la optimización de cada lecho catalítico.

Variables de diseño	Lecho 1	Lecho 2	Lecho 3
Conversión alcanzada	0.131	0.183	0.204
Masa de catalizador (kg)	4 235	4 476	6 245
Longitud (m)	1.6	1.7	2.3
T _{entrada} (°C)	400	400	400
T _{salida} (°C)	508.6	451.6	417.7
Caída de presión (kPa)	9.4	10.8	15.5

IV.3.2.5. Dimensiones del reactor

En base a los resultados obtenidos en la Tabla IV.VII se determinan las dimensiones del reactor. Según las reglas heurísticas, el flujo del gas a través de los lechos se debe producir desde la parte superior del reactor, hacia la parte inferior (Woods, 2007). En la Figura IV.6 se representa la disposición que adopta el equipo.

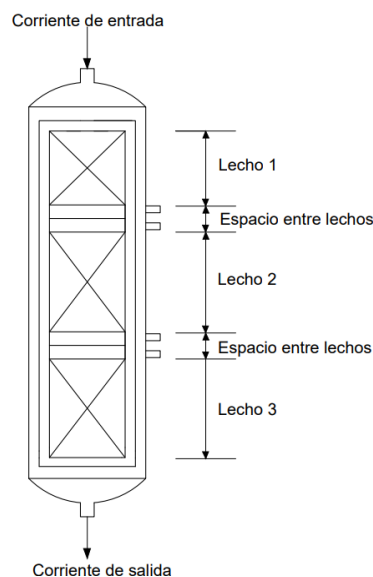


Fig.IV. 6. Configuración del reactor de lecho fijo (Elaboración propia).

En cuanto el espacio entre lechos es conveniente considerar un espacio adecuado que permita una correcta circulación del gas entre cada lecho y que sea capaz de soportar una posible expansión del lecho. Para este caso se considera un espacio entre lechos igual al diámetro interno del reactor, es decir 1.1 m. Este espacio permitirá la instalación de una boca de hombre entre cada lecho, lo que facilitará el mantenimiento del equipo y el cambio de catalizador cuando este haya completado su tiempo de vida útil.

Para introducir cada uno de los lechos en el interior del reactor, se ha optado por los soportes de la marca Topsoe, ya que estos cuentan con un diseño compatible con las dimensiones del reactor diseñado. En la Figura IV.7 se muestran los soportes indicados.

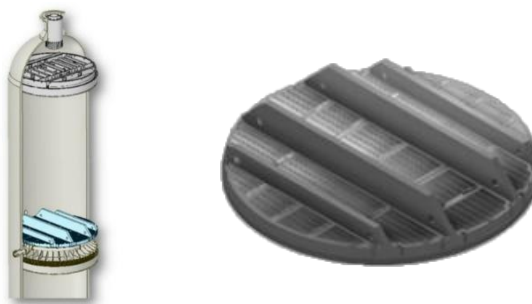


Fig.IV. 7. Sistema para el soporte del lecho catalítico de la marca Topsoe.

En cuanto a los cabezales del reactor, se considera un espacio de 0.5 metros para cada cabezal, un espacio suficiente para permitir una adecuada circulación de la corriente gaseosa.

Teniendo en cuenta los resultados de la Tabla IV.VII y las consideraciones indicadas anteriormente, se obtiene que la altura total del reactor es la que se muestra en la Tabla IV.VIII.

Tabla IV. VIII. Determinación de la altura total del reactor.

	Altura (m)
Lecho 1	1.6
Espacio entre lechos 1	1.1
Lecho 2	1.7
Espacio entre lechos 2	1.1
Lecho 3	2.3
Cabezal 1	0.5
Cabezal 2	0.5
TOTAL	8.8

Para la comprobación de los resultados, se aplica la regla heurística que indica que la relación entre la altura del reactor y el diámetro de partícula debe ser superior a 100 (Woods, 2007). Aplicando esto se obtiene una relación de 1764, lo que cumple con lo establecido.

En cuanto al diámetro del reactor, las reglas heurísticas indican que la relación entre el diámetro de partícula y el diámetro del reactor debe ser inferior a 0.10 (Woods, 2007), aplicando esto a los resultados obtenidos se obtiene un valor de 0.0045, lo que nuevamente concuerda con las heurísticas.

IV.3.2.6. Refrigeración intermedia

El sistema de refrigeración intermedia entre etapas de reacción consistirá en generación de vapor de alta presión (HP) a 250 °C. Este sistema de refrigeración permite una mayor controlabilidad y eficiencia térmica, además, puede suponer un beneficio ya que este vapor puede ser aprovechado en otros sectores de la planta.

El cálculo de la capacidad calorífica de las corrientes que deben ser refrigeradas se han realizado con la Ecuación IV.16. El calor latente de vaporización para el agua a 250 °C es 1 715 kJ/kg, lo que corresponde con una presión de saturación de 4 016 kPa (Perry y Green 1999). La cantidad de energía que debe ser retirada de cada corriente se ha calculado con la Ecuación I.20. El flujo de agua necesario para la generación de vapor se ha calculado con la Ecuación I.24.

Para determinar el área para el intercambio de calor se ha considerado un coeficiente global de transmisión de calor de 300 W/m² °C, lo que se corresponde con un sistema de intercambio vapor-gas (Towler y Sinnott, 2008), dicho valor de puede consultar en la Tabla IV-

B.VI. Finalmente, el cálculo de la temperatura media logarítmica y el área de transmisión de calor se ha realizado a partir de la ecuación I.22 y I.21 respectivamente.

Para el intercambio de calor se empleará un cambiador de carcasa y tubos. Para seleccionar cuál fluido debe circular por los tubos o la carcasa, se debe atender a varios criterios, en el caso de las corrientes de salida de cada lecho, se encuentran en condiciones de elevada presión, además están construidas por amoniaco, un compuesto corrosivo, lo que implica que lo más apropiado será que esta corriente circule por los tubos.

Los resultados obtenidos para la refrigeración correspondiente a la corriente de salida del lecho 1 y el lecho 2 son los que se muestran en la Tabla IV.IX (las temperaturas de entrada y salida refieren a las condiciones de entrada y salida en el cambiador de calor).

Tabla IV. IX. Resultados para el sistema de refrigeración intermedio por generación de vapor HP.

	Lecho 1	Lecho 2
$T_{\text{salida}} (^{\circ}\text{C})$	508	452
$T_{\text{entrada}} (^{\circ}\text{C})$	400	400
$\Delta T (^{\circ}\text{C})$	108	52
$C_p (\text{kJ/kg } ^{\circ}\text{C})$	2.23	3.42
$Q (\text{MW})$	4.67	3.8
$\dot{m} (\text{kg/s})$	19.4	21.47
$\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}} (\text{kg/s})$	2.72	2.21
ΔT_{ml}	199	175
$U (\text{W/m}^2 ^{\circ}\text{C})$	300	300
$A (\text{m}^2)$	78.2	72.5

IV.3.2.7. Equipos auxiliares

3.2.7.1. Cambiadores: H-IV.1 y C-IV.4

Estos dos equipos tienen la función de acondicionar la corriente 16 y 40 procedentes de la sección II y III respectivamente, para proceder con las etapas de compresión. En cada caso se emplea un servicio diferente, en el caso de la corriente 16 se emplea vapor saturado a 186 °C y 10 bar, condiciones que sugieren las reglas heurísticas (Couper et al. 2012). En estas condiciones, el calor latente de vaporización para el agua es 2 010 kJ/kg (Perry y Green 1999). La configuración seleccionada para el cambiador de calor consiste en la circulación del vapor por los tubos y la corriente 16 por la carcasa.

En cuanto a la corriente 40, para poder refrigerarla hasta una temperatura de 25 °C, no es posible usar agua de enfriamiento, lo que implica que se debe optar por un fluido a una menor temperatura. Se ha decidido emplear amoniaco líquido a 10 bar, ya que este es el refrigerante al que se puede acceder con mayor facilidad.

Se considera una temperatura de 4 °C como un valor conservador para la entrada de amoníaco en el cambiador de calor (Bruce I., 2016). Por otra lado, teniendo en cuenta las reglas heurísticas, para refrigerantes se debe considerar una diferencia mínima de temperaturas de 5.5 °C (10 °F) (Couper et al. 2012). En estas condiciones la capacidad calorífica del amoníaco es 4.74 kJ/kg°C y su temperatura de ebullición 25 °C (Ammonia - Thermophysical Properties).

A partir de las consideraciones indicadas se obtienen los resultados de la Tabla IV.X.

Tabla IV. X. Resultados para los equipos de acondicionamiento de las corrientes 40 y 16.

Equipo	$\dot{m}_{\text{gas}}$ (kg/s)	$\dot{m}_{\text{refrigerante}}$ (kg/s)	Servicio	Q (kW)	ΔT_{ml}	A (m ²)
H-IV.1	3.6	0.17	Vapor	348.9	330.8	3.51
C-IV.4	0.8	3.8	Amoníaco	272.5	25.7	38.4

3.2.7.2. Cambiadores de refrigeración intermedia en las etapas de compresión

Para los cálculos correspondientes a las etapas de refrigeración intermedia en las compresiones, se han empleado las mismas ecuaciones que se han indicado anteriormente. En todos los casos se ha empleado agua de enfriamiento, a excepción de la primera refrigeración en la que se ha tenido que optar por amoníaco en las mismas condiciones que han sido descritas anteriormente debido a las diferencias de temperatura.

En los cálculos para las refrigeraciones con agua, se ha considerado un incremento en la temperatura de 17 °C, tal como es indicado en las reglas heurísticas para el agua de enfriamiento (Couper et al. 2012). Los resultados para cada cambiador de calor se muestran en la Tabla IV.XI.

Tabla IV.XI. Cambiadores de calor para las etapas de refrigeración intermedia entre compresiones.

Equipo	$\dot{m}_{\text{gas}}$ (kg/s)	$\dot{m}_{\text{refrigerante}}$ (kg/s)	Refrigerante	Q (kW)	ΔT_{ml}	A (m ²)
C-IV.1	3.6	0.9	Amoníaco	64.2	22.0	9.7
C-IV.2	3.6	4.3	Agua	302.7	53.2	35.5
C-IV.3	3.6	3.5	Agua	251.8	99.2	15.9
C-IV.5	0.77	6	Agua	428.1	48.3	55.4
C-IV.6	0.77	16.5	Agua	1 172.1	84.7	86.4
C-IV.7	0.77	7.82	Agua	556.6	124	28

En los cambiadores de calor para las refrigeraciones intermedias, debido a las condiciones de alta presión de la corriente gaseosa, el fluido refrigerante circulará por la carcasa en todos los casos y el gas a elevada presión por los tubos para cumplir con la regla

heurística que establece que el fluido de mayor presión debe circular por los tubos (Couper et al. 2012).

3.2.7.3. Cámara de mezclado: CM-IV.1

El objetivo de este equipo es conseguir que las corrientes procedentes de la etapa de compresión puedan mezclarse con la corriente de la recirculación y asegurar una homogeneidad en sus propiedades.

Según la bibliografía consultada, el tiempo de residencia óptimo en una cámara de mezclado estático es de 20 segundos (Mohammadi, Jafarsadegh y Ariamanesh 2015).

A partir de una simulación del punto de mezcla en el programa Aspen HYSYS se ha determinado que la densidad de la mezcla gaseosa se corresponde con un valor de 88.9 kg/m^3 . Teniendo en cuenta el flujo másico de la corriente 45 en la Tabla IV-II se obtiene un flujo volumétrico de $0.24 \text{ m}^3/\text{s}$, por tanto, a partir del tiempo de residencia de 20 segundos se obtiene que la cámara de mezclado debe tener un volumen de 4.8 m^3 .

Debido a las condiciones de alta presión y temperatura de las corrientes que se mezclan, será conveniente el uso de un material con gran resistencia, por lo que se ha optado por emplear el mismo material del cual está constituido el reactor, lo que será comentado en la sección de diseño mecánico.

3.2.7.4. Cambiador H-IV.2

Para introducir la corriente de la alimentación en el reactor, se debe calentar hasta alcanzar las condiciones de operación ($400 \text{ }^\circ\text{C}$). Debido al elevado requerimiento energético de la corriente 45 que se muestra en la Fig.IV.1, se ha optado por la implementación de Dynalene MS-1, un fluido térmico comercial constituido por sales fundidas, diseñado para intervalos de temperatura entre $250\text{-}565 \text{ }^\circ\text{C}$.

Se ha seleccionado este fluido térmico por las múltiples ventajas que presenta: alta capacidad calorífica, baja viscosidad, presión de vapor baja, estabilidad térmica y ausencia de olores (Dynalene MS-1 Technical Data Sheet).

Mediante la Ecuación I.20 se ha determinado la cantidad de energía que se debe retirar de esta corriente, obteniendo un valor de 7 MW , teniendo en cuenta este valor, se ha determinado la cantidad de fluido térmico que será necesario para satisfacer las necesidades

energéticas de la corriente de entrada al reactor, los resultados obtenidos se muestran en la Tabla IV.XII.

Tabla IV. XII. Resultados para el cambiador de calor H-IV.12.

	Corriente de entrada al reactor	Fluido térmico
$T_{\text{entrada}} (^{\circ}\text{C})$	205.4	540
$T_{\text{salida}} (^{\circ}\text{C})$	400	460
$C_p \text{ (kJ/kg } ^{\circ}\text{C)}$	1.68	1.45
$\dot{m} \text{ (kg/s)}$	21.5	60.5

Para el cálculo del área para la transmisión de calor se obtuvo ΔT_{ml} de 191.6°C mediante la ecuación I.22, el coeficiente global de transmisión de calor para un sistema gas-líquido es $300 \text{ W/m}^2\text{C}$ (Perry y Green, 1999), sustituyendo estos valores en la Ecuación I.21 se ha obtenido un área de 122 m^2 .

Considerando el elevado consumo del fluido térmico para calentar la corriente de entrada al reactor, lo más adecuado es la implementación de un circuito cerrado que permita recircular dicho fluido hacia el cambiador .

En cuanto a compatibilidad con materiales, a partir de 400°C no es recomendable el uso de acero al carbono, se recomendando el uso de acero inoxidable (Dynalene MS-1 Technical Data Sheet).

La configuración del equipo será tal que el fluido térmico circulará por la carcasa y la corriente que se precalienta antes de ser introducida en el reactor, circula por los tubos. Esto con el fin de cumplir con la regla heurística que ha sido indicada anteriormente.

IV.4. DISEÑO MECÁNICO

IV.4.1. DISEÑO MECÁNICO DEL REACTOR

Para concluir con el diseño del reactor químico se procederá con el diseño mecánico según lo establecido en el código ASME para recipientes a presión. Un aspecto crucial al momento de abordar este diseño es la selección de un material adecuado, debido a las agresivas condiciones de operación en el reactor y a la presencia de hidrógeno, nitrógeno y amoníaco.

La combinación de todos estos factores da lugar a dos fenómenos: ataque de hidrógeno y nitrógeno (Talarico y Scotto, 2015). Estas condiciones requieren de una selección específica del material para el diseño del equipo.

A elevadas temperaturas, el hierro se vuelve permeable al hidrógeno, y esta permeabilidad se incrementa en condiciones de alta presión. Como consecuencia de esto, el hidrógeno es capaz de eliminar el carbono del acero, reduciendo su dureza y resistencia mecánica (Riegel 1964). Por esta razón los aceros de baja aleación son ampliamente usados en plantas de producción de amoníaco (Talarico y Scotto, 2015). Según el estándar API 941 es recomendable el uso de aceros Cr-Mo (Rizzi y Redaelli, 2009). Teniendo en cuenta todos estos criterios, se ha seleccionado el acero SA-387, Gr.12C1.1.

El reactor está conformado por un cuerpo cilíndrico y cabezales hemisféricos. Los cabezales de este tipo son los de mayor resistencia, capaces de soportar incluso el doble de presión que un cabezal toro esférico, sin embargo, esta es la disposición de mayor coste económico. El uso de cabezales hemisféricos es recomendable para trabajar a elevadas presiones (Sinnott, 2005), siendo lo más apropiado para las condiciones en las que opera el reactor. En la Figura IV. 5. Se muestra una representación del cabezal seleccionado.

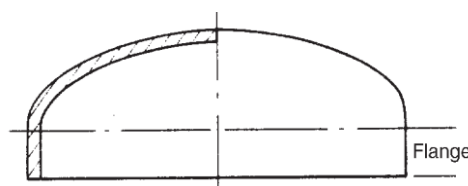


Fig.IV. 8. Representación de un cabezal hemisférico (Sinnott 2005).

El grosor de las paredes del reactor se determinará teniendo en cuenta la Ecuación I.25 referente a carcasas cilíndricas y la Ecuación IV.27 para cabezales hemisféricos.

$$t = \frac{Pr_i}{SE_j - 0.6P} + C_c \quad [I.25]$$

$$t = \frac{0.885Pr_i}{2SE_j - 0.2P} + C_c \quad [IV.27]$$

Donde cada variable se corresponde con lo que ha sido indicado en la sección I.

Se considera como presión de diseño una presión de 20 265 kPa, lo que se corresponde con un 10% de la presión máxima de operación, este valor se muestra en la Tabla IV-B.V.

Para el intervalo de temperaturas en el que trabaja el reactor (400-518 °C) la máxima tensión admisible para el acero seleccionado es 75 800 kPa. Para la eficacia de las juntas se considera un valor de 1, lo que implica que estas han sido completamente radiografiadas. Según las reglas heurísticas, para operaciones que implique sustancias corrosivas como lo es el amoníaco, se debe dejar un margen para la corrosión de 0.89 cm (0.35 in) (Peters, Max S., Timmerhaus y West, 2003). Finalmente, r_i se corresponde con el radio interno del reactor, el cual tiene un valor de 0.55 m.

Como resultado de aplicar la Ecuación I.25 y la Ecuación IV.26 se obtienen los siguientes grosores:

- Grosor para el cuerpo cilíndrico: 0.207 m.
- Grosor para los cabezales hemisféricos: 0.158 m.

Debido a la diferencia en los resultados obtenidos para el grosor, por motivos de seguridad y simplificación en el proceso de soldadura, se llevará a cabo la construcción del reactor considerando el mismo espesor, tanto en el cuerpo cilíndrico, como en los cabezales, considerándose un valor de 210 mm, lo que se encuentra dentro del intervalo de fabricación de las láminas de acero SA-387, Gr.12C1.1 (0.3 mm -1 200 mm).

Para comprobar que el diseño es correcto se debe cumplir el siguiente criterio :

$$t \leq \frac{r_i}{2} \quad [IV.28]$$

Sustituyendo en la Ecuación IV.27 se obtiene lo siguiente:

$$0.207 \text{ m} \leq \frac{0.55 \text{ m}}{2} = 0.275 \text{ m}$$

Se puede comprobar que efectivamente se cumple el criterio de la Ecuación IV.28. El valor obtenido para el grosor es superior al que se ha obtenido para otros equipos, sin embargo, al considerar las elevadas presiones en el interior del reactor, es de esperar que se requiera un grosor superior para las paredes del equipo.

IV.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA

IV.5.1. EQUIPOS

Como ha sido indicado en la sección I, para realizar la estimación económica las tablas y ecuaciones empleadas, fueron desarrolladas en 2002-2003 y para poder realizar un ajuste de los precios a la actualidad, se emplea el índice de costes que se corresponde con la Ecuación I.27.

En cuanto a la tasa de cambio entre dólar y euro, se considera la misma que ha sido indicada en la sección I, donde 1 € equivale a 1.1508 \$. De manera simplificada se asumirá que 1 \$ equivale a 0.87 €.

IV.5.1.1. Reactor R-IV.1

El coste del reactor se ha determinado en base a su peso, para ello se ha determinado el volumen de la pared cilíndrica mediante la Ecuación I.30. Para el caso de los cabezales se ha empleado la siguiente ecuación (Peters, Max Stone, Timmerhaus y West, 2003).

$$W_{\text{cabezal hemisférico}} = \rho_m \frac{2}{3} \pi r_i^3 \quad [\text{VI.29}]$$

Donde ρ_m se corresponde con la densidad del acero empleado, lo cual tiene un valor de 7800 kg/m³ (ASTM A387 Alloy Steel, grade 12, Chromium Molybdenum). A partir del peso y haciendo uso de la siguiente expresión, se determina el precio \$/kg.

$$\text{Coste } (\$/\text{kg}) = 73W^{-0.34} \quad [\text{IV.30}]$$

La Ecuación IV.30 permite calcular el precio de equipos contruidos a base de acero al carbono, sin embargo, a falta de información suficiente sobre el coste de este material, se ha optado por el uso de esta ecuación para obtener un precio estimado. Es de esperar que el acero seleccionado suponga un precio mayor.

A partir de la masa de acero requerida y aplicando la ecuación [IV.30], se determina el precio de las paredes cilíndricas y los cabezales en 2002, aplicando el índice de costes se actualiza el valor.

Por otro lado, el precio del catalizador tiene un valor de 0.020 \$/g (Masaki, Takaya y Keiichi, 2024), como el precio está referido a 2024, se considerado el valor del CEPI para dicho año (800 (The Chemical Engineering Plant Cost Index 2014)).

Finalmente, para el precio de los soportes para los lechos catalíticos de la marca TOPSOE no se ha obtenido un valor concreto de su precio, ya que esto depende de las especificaciones en el diseño del reactor, por esta razón se ha considerado un 15 % del precio total del reactor. El resultado de la estimación del coste del reactor se muestra en la Tabla IV.XI.

Tabla IV. XIII. Determinación del coste del reactor R-IV.1.

	Peso (kg)	Coste 2025 (\$)	Coste 2025 (€)
Pared cilíndrica + cabezales	11 019	86 380	75 151
Catalizador KM1R	14 956	294 147	255 908
Soportes del lecho catalítico	-	-	11 273
Equipo completo			342 331

IV.5.1.2. Compresores

La estimación del coste de los compresores se realiza media el gráfico de la Figura IV-B.II (coste en 2002). En cuanto al material de construcción para los compresores, es frecuente el uso de acero al carbono (Nair, 2001), por lo que se optará por este material.

Como compresor se ha seleccionado centrífugo acoplado a turbinas, ya que se podría aprovechar la generación de vapor que se lleva a cabo para la refrigeración del reactor. En la Tabla IV.XII se muestran los resultados de la determinación de los costes.

Tabla IV. XIV. Determinación del coste de los compresores.

Equipo	Coste 2002 (\$)	Coste 2025 (\$)	Coste 2025 (€)
CP-IV.1	120 000	305 120	265 454
CP-IV.2	180 000	457 679	398 181
CP-IV.3	200 000	508 533	442 423
CP-IV.4	210 000	533 959	464 545
CP-IV.5	215 000	546 673	475 605
CP-IV.6	400 000	1 017 065	884 847
CP-IV.7	50 000	127 133	110 606
CP-IV.8	550 000	1 398 465	1 216 664
CP-IV.9	590 000	1 500 171	1 305 149

IV.5.1.3. Cambiadores de calor

Para determinar el precio de cada uno de los cambiadores de calor, se ha empleado la gráfica de la Figura IV-B.III. (coste en 2002). Esta representación permite obtener el coste de un cambiador de carcasa y tubos. Debido a las condiciones de las corrientes se ha optado por acero inoxidable como material de construcción. En cada caso se ha tenido en cuenta un

factor de ajuste en función de la presión de operación . Los resultados de la estimación de los costes son los que se muestran en la

Tabla IV. XV. Determinación del coste de los cambiadores de calor.

Equipo	Factor	Coste 2002 (\$)	Coste 2025 (\$)	Coste 2025 (€)
H-IV.1	1.00	3 100	7 882	6 858
C-IV.4	1.00	10 200	25 935	22 564
C-IV.1	1.00	5 000	12 713	11 061
C-IV.2	1.00	10 100	25 681	22 342
C-IV.3	1.07	6 420	16 324	14 202
C-IV.5	1.00	10 800	27 461	23 891
C-IV.6	1.07	21 411	54 440	47 363
C-IV.7	1.10	9 900	25 172	21 900
H-IV.2	1.12	33 600	85 433	74 327
C-IV.9	1.31	26 200	66 618	57 957
C-IV.10	1.31	26 069	66 285	57 668

IV.5.1.4. Cámara de mezclado

Como se ha indicado anteriormente, el material de construcción de la cámara de mezclado es el mismo que en el caso del reactor, por lo tanto, se determina el coste de este equipo en base a su peso, siguiendo el mismo procedimiento indicado para el reactor, de tal forma que se obtuvo un peso de 37 440 kg en base al acero SA-387, Gr.12C1.1, dando como resultado un coste de 65 157 € en 2025.

IV.5.2. CONSUMIBLES

IV.5.2.1. Vapor calefactor

Para acondicionar la corriente procedente de la corriente 16 se emplea vapor como sistema de calefacción, siendo necesario un flujo de 0.17 kg/s. Esta operación ocurre en continuo, considerando que la planta opera 330 días al año, lo que permite un margen de tiempo para mantenimiento de los equipos. Se obtiene, por tanto, un consumo de 4 847 t/año de vapor para calefacción.

IV.5.2.2. Agua de enfriamiento

Para la refrigeración de ciertas corrientes, se utiliza agua de enfriamiento en un circuito cerrado. Siguiendo los mismos criterios establecidos en la sección I, se considera una pérdida del 7 % en este circuito. Además, se estima que el agua tarda aproximadamente 15 minutos en recorrer todo el sistema. El requerimiento total de agua para las corrientes descritas en la sección IV es de 38,12 kg/s. Con base en estos datos, el consumo anual estimado asciende a 2 402 kg/año.

IV.5.2.3. Amoníaco refrigerante

En el caso del amoníaco refrigerante, los cálculos se realizaron de manera similar a los efectuados para el agua de enfriamiento. El requerimiento total es de 3,8 kg/s, considerando que el amoníaco circula en un circuito cerrado y que se estiman pérdidas del 7 %. Bajo estas condiciones, el consumo anual calculado es de 239 kg/año.

IV.5.2.4. Fluido térmico: Dynalene

El Dynalene utilizado para el precalentamiento de la corriente que ingresa al reactor también circula en un circuito cerrado. Para este sistema, se consideran las mismas pérdidas que en los circuitos de agua y amoníaco refrigerante. Bajo estas condiciones, el consumo anual estimado del fluido térmico es de 3 812 kg/año.

IV.5.2.5. Sustitución de los lechos

Para que el reactor opere en las condiciones que han sido descritas, se requiere un cantidad de cantidad de catalizador de 14 956 kg de catalizador, lo que supone un coste de 255 908 €.

Según las especificaciones del técnicas del proveedor de KM1R, el tiempo de vida útil se encuentra entre 10-15 años si las condiciones de operación son las óptimas. Considerando que sistema de purificación previo al reactor es suficiente para lograr unas condiciones de operación óptimas, se considera un periodo de vida útil de 12 años, lo que supone 2 1325 \$/año para el mantenimiento de los lechos catalíticos.

IV.5.2.6. Electricidad

El consumo anual de electricidad en la sección IV proviene principalmente del funcionamiento de los compresores. Para compresores centrífugos de gran tamaño, las reglas heurísticas indican que su eficiencia se encuentra en el rango del 76 al 78 % (Couper et al., 2012). En este caso, se ha considerado una eficiencia promedio del 77 % para el cálculo de la potencia requerida.

Para estimar el consumo anual de energía, se ha asumido que la planta opera durante 330 días al año, lo que equivale a 7 920 horas de funcionamiento. En la Tabla IV.XVI, se presentan los resultados obtenidos para el consumo eléctrico de esta sección.

Tabla IV. XVI. Consumo eléctrico de la sección IV.

Equipo	Potencia (kW)	Potencia requerida (kW)	Consumo anual (MWh)
CP-IV.1	159	206	1 634
CP-IV.2	217	282	2 233
CP-IV.3	276	358	2 836
CP-IV.4	299	388	3 072
CP-IV.5	345	448	3 549
CP-IV.6	572	743	5 887
CP-IV.7	640	831	6 578
CP-IV.8	697	905	7 170
CP-IV.9	774	1 005	7 961
TOTAL	3 978	5 167	40 920

IV.6. BIBLIOGRAFÍA

Ammonia - Thermophysical Properties. [consulta: 7 julio 2025]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/ammonia-d_1413.html.

ASTM A387 Alloy Steel, grade 12, Chromium Molybdenum. [consulta: 5 julio 2025]. Disponible en: https://www.matweb.com/search/datasheet.aspx?matguid=d627882828c0442bb9b348825a61ce1b&utm_source=chatgpt.com&ckck=1.

BODDULA, R. y ASIRI, A.M., 2020. *Sustainable Ammonia Production*. Switzerland: Springer. Green Energy and Technology,

BRUCE I., N., 2016. *DX AMMONIA PIPING HANDBOOK*. 3rd Edition. Colville: Colmac Coil Manufacturing Inc.

COUPER, J.R., PENNEY, W.R., FAIR, J.R. y WALAS, S.M., 2012. 0 - Rules of Thumb: Summary. En: J.R. COUPER, W.R. PENNEY, J.R. FAIR y S.M. WALAS (eds.), *Chemical Process Equipment (Third Edition)*. Boston: Butterworth-Heinemann, pp. xiii-xx. [consulta: 26 mayo 2025]. ISBN 978-0-12-396959-0.

CuO catalyst (for removing oxygen from Nitrogen)-Hunan Xintan New Material CO.,Ltd. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: https://www.hnxintan.com/cpzx/CuO_catalyst_%28for_removing_oxygen_from_Nitrogen%29.html?utm_source=chatgpt.com.

D. ANNABLE, 1952. Application of the Temkin kinetic equation to ammonia synthesis in large-scale reactors. *CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE*. 4, vol. I.

Dynalene. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: <https://www.dynalene.com/gallon/1-gallon/>.

Dynalene MS-1 Technical Data Sheet [en línea], [sin fecha]. S.l.: s.n. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: <https://www.dynalene.com/wp-content/uploads/2020/08/Dynalene-MS-1-Tech-Data-Sheet-Rev1.pdf>.

DYSON, D.C. y SIMON, J.M., 1968. Kinetic Expression with Diffusion Correction for Ammonia Synthesis on Industrial Catalyst. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* [en línea], vol. 7, no. 4, pp. 605-610. [consulta: 3 marzo 2025]. ISSN 0196-4313. DOI 10.1021/i160028a013.

ELLIOT, J.R., DIKY, V., KNOTTS IV, T.A. y WILDING, W.V., 2022. *The properties of gases and liquids*. Sixth. United States of America: Mc Graw Hill. ISBN 978-1-260-11634-2.

EL-SHAFIE, M., 2023. A comprehensive assessment of ammonia synthesis reaction kinetics and rate equations. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 92, pp. 35938-35952. [consulta: 3 marzo 2025]. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2023.06.011.

FOGLER, H.S., 2001. *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Tercera. S.I.: Prentice Hall.

GILLESPIE, L.J. y BEATTIE, J.A., 1930. The Thermodynamic Treatment of Chemical Equilibria in Systems Composed of Real Gases. I. An Approximate Equation for the Mass Action Function Applied to the Existing Data on the Haber Equilibrium. *Physical Review* [en línea], vol. 36, no. 4, pp. 743-753. [consulta: 15 junio 2025]. ISSN 0031-899X. DOI 10.1103/PhysRev.36.743.

GUTIÉRREZ MARTÍN, F., 2020. *Ingeniería de procesos y productos*. Madrid: Síntesis. ISBN 978-84-1357-034-1.

HUMPHREYS, J., LAN, R. y TAO, S., 2021. Development and Recent Progress on Ammonia Synthesis Catalysts for Haber–Bosch Process. *Advanced Energy and Sustainability Research*, vol. 2, no. 1, pp. 2000043. [consulta: 3 marzo 2025]. ISSN 2699-9412. DOI 10.1002/aesr.202000043.

JAN FOLKE, HUIQING SONG, JULIAN SCHITTKOWSKI, ROBERT SCHLÖGL, y HOLGER RULAND, 2020a. *Oxygen Poisoning in Laboratory Testing of Iron-Based Ammonia Synthesis Catalysts and its Potential Sources*. 2020. S.I.: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

JAN FOLKE, HUIQING SONG, JULIAN SCHITTKOWSKI, ROBERT SCHLÖGL, y HOLGER RULAND, 2020b. *Oxygen Poisoning in Laboratory Testing of Iron-Based Ammonia Synthesis Catalysts and its Potential Sources*. ,

KHADEMI, M.H. y SABBAGHI, R.S., 2017. Comparison between three types of ammonia synthesis reactor configurations in terms of cooling methods. *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 128, pp. 306-317. [consulta: 3 marzo 2025]. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2017.10.021.

LIDE, D.R., BAYSINGER, G., CHEMISTRY, S., BERGER, L.I., GOLDBERG, R.N. y KEHIAIAN, H.V., 2005. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. ,

MASAKI, Y., TAKAYA, O. y KEIICHI, N.I., 2024. *Techno-economic analysis on recent heterogeneous catalysts for ammonia synthesis*. 2024. S.I.: Elsevier Science & Technology.

MAX APPL, 2012. Ammonia Production Processes. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Germany: vol. 3.

MOHAMMADI, A., JAFARSADEGH, M. y ARIAMANESH, A., 2015. Residence Time and Concentration Distribution in a Kenics Static Mixer. *Chemical Engineering Communications*, pp. 144-150. DOI DOI: 10.1080/00986445.2013.832225.

NAIR, M.P.S., 2001. Control corrosion factors in ammonia and urea plants. *Travancore Cochin Chemicals Ltd*,

NIELSEN, A., 1995. *Ammonia: Catalysis and Manufacture*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. ISBN 978-3-642-79199-4.

ORTLOFF, F., GRAF, F. y KOLB, T., 2014. Removal of Oxygen from Biogas via Catalytic Oxidation of Methane. ,

PERRY, R.H. y GREEN, D.W., 1999. *Perry's Chemical Engineer's Handbook*. 7th. S.I.: McGraw-Hill. ISBN 0-07-049841-5.

PETERS, Max S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. Fifth. S.I.: Mc Graw Hill. ISBN 0-07-239266-5.

PETERS, Max Stone, TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003. *Plant design and economics for chemical engineers*. 5th ed. New York: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1. TP155.5 .P4 2003

Placa de Aleación ASTM A387 GR.12, Placa, Lámina, Bobina. [consulta: 22 junio 2025]. Disponible en: <https://www.htpipe.es/placa-lamina-bobina-de-aleacion-astm-a387-gr12.html>.

POLING, B.E., PRAUSNITZ, J.M. y O'CONNELL, J.P., 2020. *Properties of Gases and Liquids, Fifth Edition*. Fifth edition. New York, N.Y: McGraw-Hill Education. McGraw-Hill's AccessEngineering, ISBN 978-0-07-011682-5.

RIEGEL, E.R., 1964. Química industrial / Riegel ; dirigida por James A. Kent ; versión española por José M. Costa ; presentación por Ángel Vian. , [1a ed. en español].

RIZZI, E. y REDAELLI, L., 2009. *Safety and Reliability in Ammonia Synthesis Converters*. 2009. S.I.: s.n.

SINNOTT, R., 2005. *Chemical Engineering Design: Chemical Engineering Volume 6*. 4th ed. Jordan Hill: Elsevier Science & Technology. Chemical Engineering Ser, ISBN 978-0-7506-6538-4.

TALARICO, P. y SCOTTO, A., 2015. *Reliable Design of Ammonia and Urea Plants*. 2015. S.l.: s.n.

The Chemical Engineering Plant Cost Index ®. *Chemical Engineering*, 2014. [consulta: 7 julio 2025]. Disponible en: <https://www.chemengonline.com/pci-home/>.

TOPSOE, 2025. *KM1/KM1R The heart of the Ammonia Plant*. 2025. S.l.: s.n.

TOWLER, G.P. y SINNOTT, R.K., 2008. *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. Amsterdam; Boston: Elsevier/Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-7506-8423-1. TP155 .T69 2008

WEEL, J., DEGN, A., JOHN, B. y KJØBSTED, J., 2024. Comparison, operation and cooling design of three general reactor types for Power-to-Ammonia processes. ,

WILHEM RUPPEL, 2012. Catalytic Fixed-Bed Reactors. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Universita't Stuttgart, Stuttgart, Germany:

WOODS, D.R., 2007. *Rules of Thumb in Engineering Practice*. 2007. S.l.: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

APÉNDICE IV-A: LISTA DE SÍMBOLOS

IV-A.1. SÍMBOLOS LATINOS

A_0	Factor pre-exponencial ecuación de Arrhenius
A_c	Área de la sección transversal del lecho catalítico
C_p	Capacidad calorífica
D_p	Diámetro de partícula
E_a	Energía de activación
F_{N_20}	Flujo molar de nitrógeno en la alimentación al reactor
f_i	Coefficiente de fugacidad del compuesto i
F_i	Flujo molar del compuesto i
G	Velocidad superficial
k_2	Constante cinética para la reacción inversa a la síntesis de amoníaco
K_a	Constante de equilibrio termodinámico en actividades
L	Longitud del lecho catalítico
M	Masa molecular
$\dot{m}$	Flujo másico
P	Presión del sistema
P_0	Presión inicial del sistema
P_c	Presión del punto crítico
P_R	Presión en coordenadas reducidas
R	Constante de los gases ideales
r_{NH_3}	Velocidad intrínseca de reacción referida al amoníaco
$(r_{NH_3})_W$	Velocidad intrínseca de reacción referida al amoníaco por masa de catalizador
T	Temperatura del sistema
T_0	Temperatura inicial del sistema
T_c	Temperatura en el punto crítico
$T_{entrada}$	Temperatura de entrada de una corriente a un equipo

T_R	Temperatura en coordenadas reducidas
T_{salida}	Temperatura de salida de una corriente desde un equipo
U	Coeficiente global de transmisión de valor
W	Masa de catalizador
X_{N_2}	Conversión en base al reactivo limitante
Z	Factor de expansión

IV-A.2. SÍMBOLOS GRIEGOS

α	Coeficiente adimensional que representa la adsorción del nitrógeno
δ	Variación de los coeficientes estequiométricos
ΔH_R	Entalpía de reacción
ΔT	Incremento de temperatura
ΔT_{ml}	Temperatura media logarítmica
ε	Factor de expansión
μ	Viscosidad dinámica
μ_m	Viscosidad dinámica de la mezcla gaseosa
ρ	Densidad
Φ	Esfericidad
φ	Coeficiente de fugacidad

IV-A.3 NOMENCLATURA PROPIA DEL CÓDIGO ASME

c_c	Margen de grosor por corrosión
E_j	Eficacia de junta

P	Presión manométrica de operación
r_i	Radio interno de la carcasa antes de la adición del margen por corrosión
S	Presión máxima de trabajo
t	Grosor de la pared
W	Peso
ρ_m	Densidad del material

IV-A. 4 ABREVIATURAS

HP	Vapor de alta presión

APÉNDICE IV-B: TABLAS, GRÁFICAS Y CÁLCULOS ADICIONALES

IV.6.1. TABLAS FIGURAS PARA EL CÁLCULO DE PROPIEDADES FÍSICAS

Tabla IV-B. I. Coeficientes para el cálculo del factor de efectividad (Dyson y Simon 1968)

Presión (atm)	b ₀	b ₁	b ₂	b ₃	b ₄	b ₅	b ₆
150	-17.539096	0.07697849	6.900548	-1.082790 10 ⁻⁴	-26.42469	4.927648 10 ⁻⁸	38.93727
225	-8.2125534	0.03774149	6.190112	-5.354571 10 ⁻⁵	-20.86963	2.379142 10 ⁻⁸	27.88403
300	-4.6757259	0.02354872	4.687353	-3.463308 10 ⁻⁶	-11.28031	1.540881 10 ⁻⁸	10.46627

Tabla IV-B. II. Coeficientes para las expresiones polinómicas de las capacidades caloríficas (Lide et al. 2005)

Compuesto	a	b	c
H ₂	6.88	0.066 10 ⁻³	0.297 10 ⁻⁶
N ₂	6.3	1.819 10 ⁻³	-0.345 10 ⁻⁶
NH ₃	5.92	8.963 10 ⁻³	-1.764 10 ⁻⁶
O ₂	6.13	2.99 10 ⁻³	-0.806 10 ⁻⁶
Ar	4.9675	-	-

Tabla IV-B. III. Propiedades críticas (Poling, Prausnitz y O'Connell 2020)

Compuestos	T _c (K)	P _c (bar)	Z _c
Nitrógeno	126.2	33.9	0.29
Hidrógeno	33.2	13	0.305
Amoniaco	405.6	112.8	0.242

Tabla IV-B. IV. Coeficientes para el cálculo de la viscosidad (Perry y Green 1999)

Compuesto	A	B	C	D
H ₂	1.8 10 ⁻⁴	6.85 10 ⁻¹	-5.90 10 ⁻¹	1.40 10 ²
N ₂	6.56 10 ⁻⁴	6.08 10 ⁻¹	5.47	-
NH ₃	4.19 10 ⁻⁵	9.81 10 ⁻¹	3.08	-

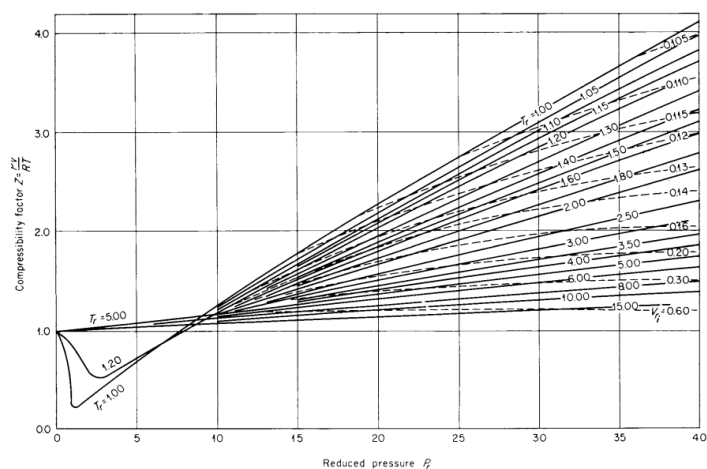
FIGURE 4.3 Generalized compressibility chart for all P_r , $V_r = V/(RT_c/P_c)$. (Nelson and Obert 1954.)

Fig.IV-B. I. Diagrama generalizado (Elliot et al. 2022)

IV.6.2. PARÁMETROS DEL CATALIZADOR

Tabla IV-B. V. Parámetros del catalizador comercial de Haldor Topsoe (Peters, Max S., Timmerhaus y West 2003)

Designation	Nominal Size	Surface Area (m ² /g)	Total Void Fraction	$D_{eff}^b \times 10^3$ (cm ² /sec)	Average Tortuosity Factor τ_p Parallel-Path Pore Model	$r_e = 2V_e/S_e$ (Å)	τ_m Based on Average Pore Radius
T-126	3/16 × 1/8 in.	197	0.384	29.3	3.7 ± 0.2	29	0.45
T-1258		302	0.478	33.1	3.8 ± 0.2	23.6	0.41
T-826		232	0.389	37.7	3.9 ± 0.1	21.4	0.26
T-314		142	0.488	20.0	7.1 ± 0.9	41.5	1.2
T-310		154	0.410	16.6	3.8 ± 0.1	34.3	0.67
G-39	3/16 × 3/16 in.	190	0.354	17.5	4.8 ± 0.3	22.4	0.53
G-35		—	0.354	18.2	4.9 ± 0.1	—	—
T-606		—	0.115	27.7	2.9 ± 0.2	—	—
G-58		6.4	0.389	87.0	2.8 ± 0.3	543.	2.87
T-126		165	0.527	38.8	3.6 ± 0.3	49.0	0.79
T-606	1/4 × 1/4 in.	—	0.092	0.71	79 ± 28	—	—
G-41		—	0.447	21.9	4.4 ± 0.1	—	—
G-52		—	0.436	27.4	3.9 ± 0.2	—	—
G-56		42	0.304	8.1	11.1 ± 1.1	84.	3.74
BASF		87.3	0.500	11.8	7.3 ± 0.7	41.	2.05
Harshaw	1/4 × 1/4 in.	44	0.489	13.3	7.2 ± 0.1	91.	3.95
Haldor Topsoe	1/4 × 1/4 in.	143	0.433	15.8 ^a	2.8	25.8	0.83

IV.6.1. TABLAS Y CÁLCULOS PARA LOS EQUIPOS DE TRANSMISIÓN DE CALOR

Tabla IV-B. VI. Coeficientes globales para la transmisión de calor en cambiadores de calor de carcasa y tubos (Towler y Sinnott 2008).

Shell and Tube Exchangers		
Hot Fluid	Cold Fluid	U (W/m ² ·C)
<i>Heat exchangers</i>		
Water	Water	800–1500
Organic solvents	Organic solvents	100–300
Light oils	Light oils	100–400
Heavy oils	Heavy oils	50–300
Gases	Gases	10–50
<i>Coolers</i>		
Organic solvents	Water	250–750
Light oils	Water	350–900
Heavy oils	Water	60–300
Gases	Water	20–300
Organic solvents	Brine	150–500
Water	Brine	600–1200
Gases	Brine	15–250
<i>Heaters</i>		
Steam	Water	1500–4000
Steam	Organic solvents	500–1000
Steam	Light oils	300–900
Steam	Heavy oils	60–450
Steam	Gases	30–300
Dowtherm	Heavy oils	50–300
Dowtherm	Gases	20–200
Flue gases	Steam	30–100
Flue	Hydrocarbon vapors	30–100
<i>Condensers</i>		
Aqueous vapors	Water	1000–1500
Organic vapors	Water	700–1000
Organics (some noncondensables)	Water	500–700
Vacuum condensers	Water	200–500
<i>Vaporizers</i>		
Steam	Aqueous solutions	1000–1500
Steam	Light organics	900–1200
Steam	Heavy organics	600–900
Air-cooled Exchangers		
Process Fluid		U (W/m ² ·C)
Water		300–450
Light organics		300–700
Heavy organics		50–150
Gases, 5–10 bar		50–100
10–30 bar		100–300
Condensing hydrocarbons		300–600

(continued)

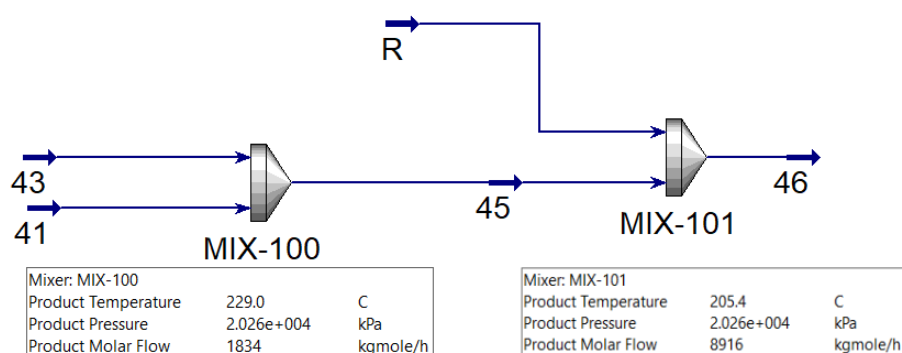


Fig.IV-B. II. Simulación del punto de mezcla en el programa Aspen HYSYS. Las corrientes 43, 41, 45 y 46 corresponden a las de la Tabla IV-II y R es la corriente de la recirculación.

Para el cálculo de las entalpías en los balances de materia y energía de la Tabla IV-I y Tabla IV-II todos los valores de capacidad calorífica para cada corriente ha sido extraídos a partir del programa Aspen HYSYS.

Tabla IV. XVII. Propiedades del fluido térmico Dynalene MS-1 (Dynalene MS-1 Technical Data Sheet).

Composition:	Salt mixture
Appearance:	White solids
Odor:	None
Freezing Point:	225°C (437°F)
Max Operating Temp:	565°C (1050°F)
Latent Heat:	117 J/g
Thermal Conductivity*:	0.50 W/mK
Specific Heat*:	1.40 J/gK
Density*:	1.90 g/cm ³
Viscosity*:	4.0 cP
Freezing Contraction:	3%

*Measured at 300°C (572°F)

IV.6.1. TABLAS PARA EL DISEÑO MECÁNICO

Tabla IV-B. VII. Selección del acero para el diseño mecánico según el código ASME.

Joint efficiencies	Recommended stress values		
	Metal	Temp., °C	S, kPa
For double-welded butt joints	Carbon steel	-29 to 343	94,500
If fully radiographed = 1.0	(SA-285, Gr. C)	399	82,700
If spot-examined = 0.85		454	57,200
If not radiographed = 0.70			
In general, for spot examined	Low-alloy steel	-29 to 427	94,500
If electric resistance weld = 0.85	for resistance to	510	75,800
If lap-welded = 0.80	H ₂ and H ₂ S	565	34,500
If single-butt-welded = 0.60	(SA-387, Gr.12C1.1)	649	6,900
	High-tensile steel	-29 to 399	137,900
	for heavy-wall	454	115,800
	vessels	510	69,000
	(SA-302, Gr.B)	538	42,750
	High-alloy steel	-29	128,900
	for cladding and	343	77,200
	corrosion resistance	427	72,400
	Stainless 304	538	66,900
	(SA-240)		
	Stainless 316	-29	128,900
	(SA-240)	345	79,300
		427	75,800
		538	73,100
	Nonferrous metals		
	Copper	38	46,200
	(SB-11)	204	20,700
	Aluminum	38	15,900
	(SB-209, 1100-0)	204	6,900

Tabla IV-B. VIII. Composición química del acero SA387 (Placa de Aleación ASTM A387 GR.12, Placa, Lámina, Bobina)

Grado	Cs	Mn	Ps	Ss	Sis	Cr	Mo
GR.12	0.04-0.17	0.35-0.73	0.035	0.035	0.13-0.45	0.74-1.21	0.4-0.65

IV.6.1. TABLAS PARA LA ESTIMACIÓN DEL COSTE DE LOS EQUIPOS

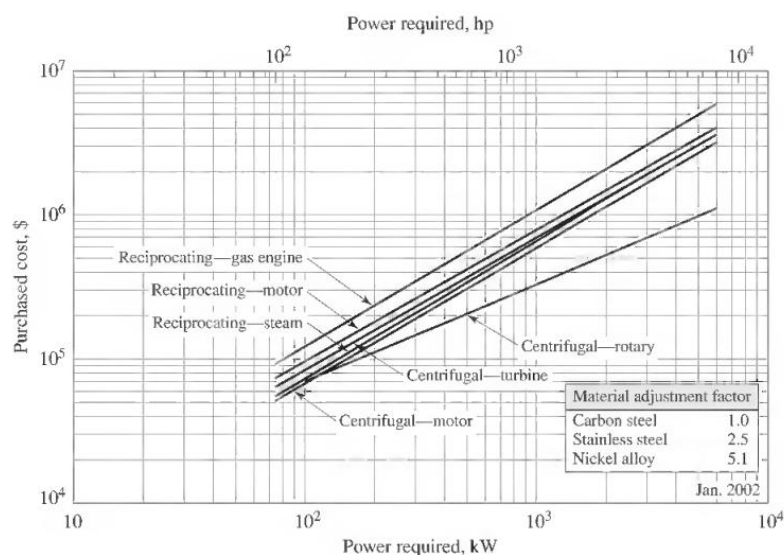


Fig.IV-B. III. Estimación de costes para compresores centrífugos-turbina (Peters, Max Stone, Timmerhaus y West 2003).

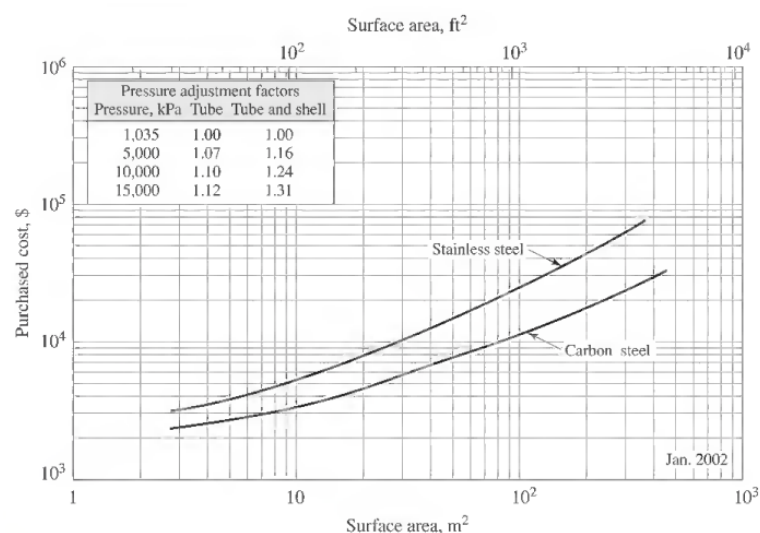


Fig.IV-B. IV. Estimación de costes para cambiadores de calor de carcasa y tubos (Peters, Max Stone, Timmerhaus y West 2003)

IV.6.1. CÓDIGO MATLAB PARA LA SIMULACIÓN DEL REACTOR

```
% Resolución del sistema de ecuaciones diferenciales mediante el método de
% Euler para el diseño de un reactor de lecho fijo catalítico:

% PRIMER LECHO
% Antes de ejecutar el programa se debe limpiar la memoria del workspace
clear %LIMPIA WORKSPACE
clc % LIMPIA COMMAND WINDOW

% Se parte de las condiciones de entrada al reactor que se serán las
% correspondientes a las de la etapa anterior
TC0= 400; % Temperatura de la alimentación, °C
T0 = TC0+273; % Temperatura de la alimentación, K
P0= 200; % Presión de la mezcla de entrada, atm

% FLUJOS DE ENTRADA AL REACTOR.
% Flujos de la recirculación
RN2 =1770.069322;
RH2= 5224.078721;
RNH3= 83.5379569;
RAr= 3.840634619;
RO2= 0.00004586201;

% Valores modificables en función de lo que se obtenga en las secciones previas

FN2_in= 458.5+RN2; % Flujo molar de nitrógeno en la alimentación, kmol/h
FH2_in= 1375.5+RH2; % Flujo molar de hidrógeno en la alimentación, kmol/h
FNH3_in= RNH3; % Flujo molar de amoníaco en la alimentación, kmol/h
FO2_in=0.0000458620+RO2; % Flujo molar de inertes en la alimentación, kmol/h
FAr_in= 0.12+RAr; % Flujo molar de inertes en la alimentación, kmol/h

% Se calcula el flujo molar total a la entrada del reactor
Ftot_in= FN2_in+FH2_in+FNH3_in+FO2_in+FAr_in;

% Calculan las fracciones molares iniciales
yN2_in= FN2_in/Ftot_in;
yH2_in= FH2_in/Ftot_in;
yNH3_in = FNH3_in/Ftot_in;
yAr_in= FAr_in/Ftot_in;
yO2_in= FO2_in/Ftot_in;

% Pesos moleculares de cada uno de los compuestos
M_NH3= 17.031; % kg/kmol
M_H2= 2.016; % kg/kmol
M_N2= 28.0134; % kg/kmol
M_O2= 31.999; % kg/kmol
M_Ar = 39.948; % kg/kmol

% Parámetros del catalizador
deq= 0.005; % Diámetro equivalente partícula del catalizador, m
por = 0.55; % Porosidad del catalizador
rho_b= 2800; % Densidad del lecho, kg/m^3
Esf=0.5; % Esfericidad de las partículas de catalizador

%Modelo cinético y termodinámico
R= 0.08206; % Constante de los gases ideales, atmm^3/KmolK
a= 0.55; %Parámetro que toma distintos valores según como sea la adsorción del nitrógeno

% Parámetros para el cálculo del factor de efectividad. 225 atm
b0= -8.2125534;
```

```

b1=0.03774149;
b2=6.190112;
b3=-5.354571*10^-5;
b4=-20.86963;
b5=2.379142*10^-8;
b6=27.88403;

% Se calcula el factor de expansión según los coeficientes estequiométricos
% de la reacción y la composición de la mezcla inicial
eps= -2*yN2_in;

% Se procede con la resolución de los balances de materia, energía y
% cantidad de movimiento
% 1) Se debe asignar un valor muy pequeño de paso a la variable de masa de
% catalizador

dW=0.5;

% Se establecen las condiciones iniciales para evaluar las ecuaciones
% diferenciales. Dichas condiciones se corresponden con las de entrada al
% reactor. Se parte de la suposición inicial de que no hay conversión a la
% entrada
% 2) Se establecen las condiciones iniciales

W0=0;
XN20= 0;
L0= 0; % , m
r=0.55; % Radio, m
D=r*2; % Diámetro, m

% Para resolver las EDOs se debe iterar, por tanto, para almacenar al valor
% de las variables en cada iteración, se debe generar un vector para cada
% variable
% Variables de diseño
W(1)=W0;
XN2(1)=XN20;
P(1)=P0;
T(1)= T0;
L(1)=L0;

% Flujos molares de cada compuesto, kmol/h
FN2(1)= FN2_in;
FH2(1) =FH2_in;
FNH3(1)=FNH3_in;
FO2(1)= FO2_in;
FAr(1)= FAr_in;
Ftot(1) = Ftot_in;

% Flujos másicos de cada compuesto
FN2_m(1)= FN2_in*M_N2; % kh/h de N2
FH2_m(1)= FH2_in*M_H2; %kh/h de H2
FNH3_m(1)=FNH3_in*M_NH3; %kh/h de NH3

% Se inicia el bucle iterativo
max_iter= 30000; % Número máximo de iteraciones para evitar bucles infinitos

for i=1:max_iter

    %Se definen los coeficientes de fugacidad

    phi_N2(i) = (0.9343)+(3.102*10^-4)*T(i) + (2.959*10^-4)*P(i) - (2.707*10^-7)*(T(i)^2) +
    (4.775*10^-7)*(P(i)^2); %Coeficiente de fugacidad del nitrógeno

```



```

phi_H2(i) = exp((exp(-3.84*(T(i)^0.125+0.451))*P(i)-(exp(-0.1263*T(i)^0.5-
15.98))*P(i)^2)+300*exp(-0.0119*T(i)-5.941)*(exp((-P(i)/300)-1))); %Coeficiente de
fugacidad del hidrógeno
phi_NH3(i) = (0.1439)+(2.029*10^-3)*T(i) - (4.488*10^-4)*P(i) - (1.143*10^-
6)*(T(i)^2)+(2.7661*10^-7*(P(i)^2)); %Coeficiente de fugacidad de amoniaco

% Fracciones molares de cada uno de los compuestos en función de la
% conversión
yN2(i) = (FN2_in*(1-XN2(i)))/(Ftot_in-2*FN2_in*XN2(i));
yH2(i) = (FN2_in-3*FN2_in*XN2(i))/(Ftot_in-2*FN2_in*XN2(i));
yNH3(i) = (FN2_in+2*FN2_in*XN2(i))/(Ftot_in-2*FN2_in*XN2(i));
yO2(i) = (FO2_in)/(Ftot_in-2*FN2_in*XN2(i));
yAr(i) = (FAr_in)/(Ftot_in-2*FN2_in*XN2(i));
% Propiedades del fluido dependientes de la temperatura/composición
Z1= 1.05; % Factor de compresibilidad condiciones iniciales
Z2= 1.11; % Factor de compresibilidad condiciones de salida del primer lecho

% Se considera un valor medio para el factor de compresibilidad entre
% las condiciones de entrada al reactor y salida del primer lecho
Z= (Z1+Z2)/2; % Factor de compresibilidad. Indica la desviación del comportamiento
ideal.

M_m(i)= (yNH3(i)*M_NH3)+(yN2(i)*M_N2)+(yH2(i)*M_H2)+(yO2(i)*M_O2)+(yAr(i)*M_Ar); % Masa
molecular media de la mezcla gaseosa
rho_m(i)=(P(i)*M_m(i))/(R*T(i)*Z); % Densidad de la mezcla gaseosa, kg/m3

% Cálculo del flujo volumétrico y la velocidad superficial
Q(i)=Ftot(i)*M_m(i)/(rho_m(i)*3600);% Flujo volumétrico, m3/s
Ac=(pi*(2*r)^2)/4;
G(i)=(Ftot(1)*M_m(1))/(rho_m(1)*Ac)/3600; % Velocidad superficial, m/s

%Se calculan las fugacidades
fN2(i) = phi_N2(i)*yN2(i)*P(i); % Fugacidad del nitrógeno
fH2(i) = phi_H2(i)*yH2(i)*P(i); % Fugacidad del hidrógeno
fNH3(i) = phi_NH3(i)*yNH3(i)*P(i); % Fugacidad del amoniaco
% Parámetros cinéticos
Ao= 8.849*10^14; %Factor pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius determinado por
Nielsen, kmolNH3/h*m^3
Ea=40765*4.184; % Energía de activación determinada por Nielsen, kJ/kmol
k2(i) = Ao*exp(-Ea/(8.314477*T(i))); %Constante cinética de la reacción inversa,
kmolN2/h*m^3
Ka(i)= 10^((-2.691122*log10(T(i)))- (5.519265*10^-5)*T(i)+(1.848863*10^-7)*T(i)^2 +
(2002.6/T(i)) + 2.69899)); %Constante de equilibrio

% Cinética de la reacción según el modelo de Temkin. Modificada por
% Dyson-Simon
% Velocidad de reacción intrínseca
rNH3(i) = 2*k2(i)*(((Ka(i)^2)*(fN2(i))*((fH2(i)^3)/fNH3(i)))^(a)-
((fNH3(i)^2)/(fH2(i)^3))^(1-a));
rNH3_W(i)=rNH3(i)/rho_b; % Velocidad de reacción del nitrógeno en función de la masa de
catalizador

% Calculo del factor de efectividad mediante una correlación
n(i)=b0+(b1*T(i))+(b2*XN2(i))+(b3*T(i)^2)+(b4*XN2(i)^2)+(b5*T(i)^3)+(b6*XN2(i)^3);

% Propiedades para el balance de cantidad de movimiento

% Para calcular la viscosidad de cada uno de los compuestos se emplea una
% expresión extraída del manual Perry que permite calcular la viscosidad en
% función de la temperatura. Se emplean coeficientes para cada uno de los
% compuestos. La temperatura se debe introducir en Kelvin y el resultado se obtiene en
cP

```

```

vis_NH3(i)= ((4.19*(10^-5))*(T(i)^(9.81*(10^-1))))/(1+((3.08*10)/T(i))); % Viscosidad
del amoníaco en función de la temperatura, cP
vis_N2(i)= ((6.56*(10^-4))*(T(i)^(6.08*(10^-1))))/(1+((5.47*10)/T(i))); % Viscosidad
del nitrógeno en función de la temperatura, cP
vis_H2(i)= ((1.8*(10^-4))*(T(i)^(6.85*(10^-1))))/(1+((-5.90*(10^-
1))/T(i))+((1.40*10^2)/T(i)^2)); % Viscosidad del hidrógeno en función de la
temperatura; cP

% Para calcular la viscosidad de la mezcla gaseosa se emplea el modelo de
% Wilke. Se considera lo siguiente:
% N2:1
% H2:2
% NH3:3

% Se calcula el número adimensional para cada caso
phi_11(i)= 1;
phi_12(i)= (1/8^0.5)*((1+(M_N2/M_H2))^(-
0.5))*(1+((vis_N2(i)/vis_H2(i))^0.5)*(M_H2/M_N2)^(1/4))^2;
phi_13(i)= (1/8^0.5)*((1+(M_N2/M_NH3))^(-
0.5))*(1+((vis_N2(i)/vis_NH3(i))^0.5)*(M_NH3/M_N2)^(1/4))^2;
phi_21(i)= (1/8^0.5)*((1+(M_H2/M_N2))^(-
0.5))*(1+((vis_H2(i)/vis_N2(i))^0.5)*(M_N2/M_H2)^(1/4))^2;
phi_22(i)= 1;
phi_23(i)= (1/8^0.5)*((1+(M_H2/M_NH3))^(-
0.5))*(1+((vis_H2(i)/vis_NH3(i))^0.5)*(M_NH3/M_H2)^(1/4))^2;
phi_31(i)= (1/8^0.5)*((1+(M_NH3/M_N2))^(-
0.5))*(1+((vis_NH3(i)/vis_N2(i))^0.5)*(M_N2/M_NH3)^(1/4))^2;
phi_32(i)= (1/8^0.5)*((1+(M_NH3/M_H2))^(-
0.5))*(1+((vis_NH3(i)/vis_H2(i))^0.5)*(M_H2/M_NH3)^(1/4))^2;
phi_33(i)= 1;

sum_xjphi_1j(i)= (yN2(i)*phi_11(i))+(yH2(i)*phi_12(i))+(yNH3(i)*phi_13(i));
sum_xjphi_2j(i)= (yN2(i)*phi_21(i))+(yH2(i)*phi_22(i))+(yNH3(i)*phi_23(i));
sum_xjphi_3j(i)= (yN2(i)*phi_31(i))+(yH2(i)*phi_32(i))+(yNH3(i)*phi_33(i));
% Se calcula la viscosidad de la mezcla gaseosa
x1vis(i)= (yN2(i)*vis_N2(i))/(sum_xjphi_1j(i));
x2vis(i)= (yH2(i)*vis_H2(i))/(sum_xjphi_2j(i));
x3vis(i)= (yNH3(i)*vis_NH3(i))/(sum_xjphi_3j(i));
vis(i)= (x1vis(i)+x2vis(i)+x3vis(i))*0.001; % Se obtiene la viscosidad de la mezcla
gaseosa en función de la temperatura, Pa*s

% Una vez planteados todos los parámetros que se deben calcular para
% cada iteración, se procede a resolver el sistema de EDOs mediante el
% método de Euler

W(i+1)= W(i)+dW;
XN2(i+1)= XN2(i)+((n(i)*rNH3_W(i))/(2*FN2_in))*dW;
% Se calculan los flujos para cada iteración
FN2(i+1)=FN2_in*(1-XN2(i+1));
FH2(i+1)=FH2_in-3*FN2_in*XN2(i+1);
FNH3(i+1)=FNH3_in+2*FN2_in*XN2(i+1);
FO2(i+1)=FO2_in;
FAr(i+1)= FAr_in;
Ftot(i+1)=FN2(i+1)+FH2(i+1)+FNH3(i+1)+FO2(i+1)+FAr(i+1);

% Se calcula el calor específico de la mezcla gaseosa
% Coeficientes de la expresión polinómica para calcular Cp

% Coeficientes Nitrógeno
AN2=6.30;
BN2=1.819*10^-3;
CN2= -0.345*10^-6;
% Coeficientes Hidrógeno
AH2= 6.88;

```

```

BH2=0.066*10^-3; CH2=0.297*10^-6;

% Coeficiente Argón
AAr=4.9675;
% Coeficientes Oxígeno
AO2= 6.13;
BO2 =2.99*10^-3;
CO2 = -0.806*10^-6;
% Coeficientes Amoniaco
ANH3 = 5.92;
BNH3= 8.963*10^-3;
CNH3= -1.764*10^-6;

% Cálculo de las capacidades caloríficas
Cp_N2(i)=4.184*(AN2+(BN2*T(i))+(CN2*(T(i))^2)); % Capacidad calorífica N2; kJ/kmol
Cp_H2(i)= 4.184*(AH2+(BH2*T(i))+(CH2*(T(i))^2)); % Capacidad calorífica H2; kJ/kmol
Cp_O2(i)= 4.184*(AO2+(BO2*T(i))+(CO2*(T(i))^2));
Cp_NH3(i)= 4.184*(ANH3+(BNH3*T(i))+(CNH3*(T(i))^2));
Cp_Ar(i)= AAr*4.184;

% Cálculo de la capacidad calorífica de la mezcla
Cp_mix(i)=
FN2(i+1)*Cp_N2(i)+FH2(i+1)*Cp_H2(i)+FNH3(i+1)*Cp_NH3(i)+Cp_O2(i)*FO2(i+1)+FAr(i+1)*Cp_Ar(i);

% Se calcula la entalpía de reacción. Expresada en kJ/kmol NH3
Hr(i)=(P(i).*(0.5426+(840.609/T(i))+(4.5973e8/(T(i)^3)))-5.34685*T(i)-((2.525*10^-4)/(T(i)^2)))+(1.69167*10^-6)*T(i)^3-9157.09)*4.184;

% Se resuelve el balance de energía para determinar la temperatura a la
T(i+1)= T(i)-((n(i)*rNH3_W(i)*Hr(i))/(Cp_mix(i)))*dW; % K
TC(i+1)=T(i+1)-273; % °C

% Cálculo de la longitud del lecho
L(i+1)=L(i)+(1/(rho_b*pi*r^2))*dW; % m

% Cálculo de la velocidad superficial de la mezcla gaseosa a través del
% lecho
G(i+1)=G(i)*(1+eps*XN2(i))*((P0*T(i))/(P(i)*T0)); %En m/s

% Se resuelve el balance de cantidad de movimiento
% Se multiplica por (1/101325) para obtener la presión en unidades de
% atm
P(i+1)=P(i)-(1/(rho_b*2*pi*Ac))*((150*(1-por)^2*vis(i)*G(i))/(por^3*deq^2*Esf^2)+1.75*(1-por)*rho_m(i)*(G(i)^2)/(Esf*por^3*deq))*(1/101325)*dW; %En atm

% Caudales máxicos a la salida del primer lecho
FN2_m(i)= FN2(i)*M_N2; % kh/h de N2
FH2_m(i)= FH2(i)*M_H2; %kh/h de H2
FNH3_m(i)=FNH3(i)*M_NH3; %kh/h de NH3

% Condición de parada
if XN2(i+1)>=0.131
    break
end
end

```

Para la resolución de las ecuaciones diferenciales mediante el código indicado, se ha requerido un total de 8470 iteraciones para el primer lecho, 8952 en el segundo y 12940 para el tercero.

Tabla IV-B. IXFlujos molares a la salida de cada lecho catalítico.

Flujo molar (kmol/h)	Lecho 1	Lecho 2	Lecho 3
F_{N_2}	1937	1821	1740
F_{H_2}	5724	5375	5236
F_{NH_3}	667	900	993
F_{Ar}	3.96	3.96	3.96
F_{O_2}	$4.59 \cdot 10^{-5}$	$4.59 \cdot 10^{-5}$	$4.59 \cdot 10^{-5}$
TOTAL	83312	8100	7972



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**SECCIÓN V: SEPARACIÓN Y PURIFICACIÓN
DEL AMONIACO VERDE**

Por

Carmen Ana Rodríguez Menéndez

Oviedo, julio de 2025

ÍNDICE

V.1. INTRODUCCIÓN	305
V.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	307
V.3. DISEÑO DE LAS ETAPAS DE SEPARACIÓN Y PURIFICACIÓN DEL AMONIACO	308
V.3.1.DESCRIPCIÓN DE LAS UNIDADES	316
V.3.1.1. Enfriamiento de la corriente de salida del reactor y primera condensación	316
V.3.1.2. Segunda etapa de condensación	317
V.3.1.3. Separadores gas-líquido	317
V.3.1.4. Torre de destilación	318
V.3.2.ESTRATEGIA DE DISEÑO Y RESULTADOS	318
V.3.2.1. Refrigeración en cambiadores C-V.1, C-V.2 y C-V.3	319
V.3.2.2. Condensación parcial del amoniaco en el condensador C-V.4	320
V.3.2.3. Separadores Gas-Líquido (S-V.1 y S-V.2)	333
V.3.2.4. Purificación del amoniaco y almacenamiento	337
V.3.2.5. Bucle de recirculación y purga	339
V.4. DISEÑO MECÁNICO	335
V.4.1. DISEÑO MECÁNICO DEL SEPARADOR GAS-LÍQUIDO S-V.1	343
V.4.1.1. Código ASME para recipientes a presión	343
V.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA	338
V.5.1.EQUIPOS	347
V.5.2.UTILITIES	349
V.6. BIBLIOGRAFÍA	339
APÉNDICE V-A: LISTA DE SÍMBOLOS	356

V-A.1. Símbolos latinos	357
V-A.2. Símbolos griegos	357
APÉNDICE V-B: TABLAS Y GRÁFICAS	348
APÉNDICE V-C: OTROS CÁLCULOS	355
V-C.1. DISEÑO DEL TANQUE AGITADO	355
V-C.2. DIMENSIONADO DE LA TORRE DE DESTILACIÓN T-V.1	366

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla V.1. Balances de materia y energía de la sección V. Corrientes 47-54.	314
Tabla V.2. Balances de materia y energía de la sección V. Corrientes 55-66.	314
Tabla V.3. Condiciones de los cambiadores C-V.1, C-V.2 y C-V.3	320
Tabla V.4. Condiciones de las corrientes caliente y fría del cambiador C-V.4.	323
Tabla V.5. Propiedades térmicas y números adimensionales para la mezcla gaseosa.	325
Tabla V.6. Dimensionado de la carcasa.	328
Tabla V.7. Cálculo de la caída de presión en los tubos y en la carcasa del C-V.4.	330
Tabla V.8. Altura del separador gas-líquido S-V.1.	336
Tabla V.9. Dimensionado del separador S-V.2.	336
Tabla V.10. Calor requerido para acondicionar la corriente de recirculación al reactor.	341
Tabla V.11. Costes cambiadores calor.	347
Tabla V.12. Coste válvulas.	349

APÉNDICES

Tabla V-B. I. Simulación de la fracción líquida y vapor del amoníaco en función de la temperatura en el separador S-V.1. (Simulado en ASPEN HYSYS)	358
Tabla V-B. II. Flujo molar de amoníaco en las corrientes de salida del separador S-V.2.	358
Tabla V-B. III. Producto UA y consumo energético del C-V.4 en función de la temperatura.	360
Tabla V-B. IV. Cálculo iterativo para el cambiador C-V.4.	361
Tabla V-B. V. Valores de K y composición de las corrientes del separador S-V.1 y S-V.2.	362
Tabla V-B. VI. Cuadro resumen cambiadores de calor de la sección V.	363

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. V. 1. Diagrama de flujo de la Sección V.	307
Fig. V.2. Flujo molar de NH_3 en las corrientes del separador S-V.1 en función de la temperatura.	316
Fig. V.3. Flujo molar de amoniaco en las corrientes del separador S-V.2 en función de la temperatura del condensador C-V.5. (Aspen HYSYS)	317
Fig. V.4. Consumo energético del condensador C-V.4 en función de la temperatura.	321
Fig. V.5. Variación del coeficiente global de transmisión de calor UA de C-V.4 en función de la temperatura.	321
Fig. V.6. Factor de corrección de la temperatura para un cambiador 1:2.	324
Fig. V.7. Posibles arreglos de tubos.(Egusquiza 2011)	327
Fig. V. 8. Fracción molar de NH_3 en las corrientes del segundo separador flash S-V.5.	331
Fig. V.9. Consumo del condensador C-V.5 frente a la temperatura.	331
Fig. V.10. Flujo molar del amoniaco en el segundo separador.	332
Fig.V.11. Estimación de la altura del separador.	335
Fig. V.12. Cabezal cónico.	343

APÉNDICES

Fig. V-B. 1. Selección del compresor de la recirculación.	3624
Fig. V-B. 2. Agitador de tipo hélice.	365

V.1. INTRODUCCIÓN

La síntesis del amoniaco tiene lugar por medio de una reacción, que, generalmente, alcanza una conversión baja, en este caso concreto, del 20%. Esto implica que gran parte de los reactivos permanecen sin reaccionar abandonando el reactor junto al amoniaco producido. La corriente de salida del reactor consiste, entonces, en una mezcla en estado gaseoso, conformada por el amoniaco, capaz de condensar a una temperatura razonable al encontrarse bajo una elevada presión, así como hidrógeno, nitrógeno, y trazas de argón y oxígeno, que requieren temperaturas criogénicas para cambiar de fase, como se muestra en la Tabla IX.

El objetivo de esta última sección del proyecto comprende la separación del amoniaco de los reactivos no reaccionados y su posterior purificación, eliminando las posibles impurezas presentes. Para llevar a cabo esta separación, se va a enfriar la corriente de salida del reactor y, aprovechando la diferencia de volatilidades entre los componentes, se realizará una condensación parcial y selectiva al amoniaco, logrando así recuperar gran parte de este componente en estado líquido, quedando el resto de la mezcla en estado gaseoso.

Para alcanzar el cambio de fase del amoniaco, el primer paso es reducir la temperatura de la corriente que sale del reactor (47), que se encuentra a 417 °C. Para ello, se empleará una serie de cuatro cambiadores de calor que permitirán retirar calor y aproximar la temperatura de la mezcla a la de condensación del amoniaco. Tras esto, la mezcla bifásica, se dirige a un separador gas-líquido, el cual permite obtener dos fases independientes gracias a la diferencia de densidad entre ellas. Por cabezas del tanque, saldrá un vapor que contendrá los compuestos no condensables y el amoniaco no licuado, y por colas, una corriente líquida, muy rica en amoniaco. Esta separación no es sencilla, ya que, la presencia de gases no condensables ofrece una gran resistencia al intercambio de calor.

Para favorecer la separación, se recomienda mantener una elevada presión, similar a la de la etapa de reacción, durante el proceso de condensación y separación. De este modo, con una única etapa de condensación, se lograría una producción de 28 377 t/año, muy por debajo del objetivo de este proyecto. Por tanto, se decide instalar un segundo sistema condensador parcial - separador de fases, con el fin de aumentar esta producción y alcanzar, efectivamente, 116 000 t/año.

La corriente gaseosa resultante, rica en reactivos, se recirculará al reactor, para lo que será necesario adecuarla a las condiciones de operación requeridas en el mismo. En esta corriente también se realiza una purga para evitar la acumulación de gases, como argón, que puedan ocasionar problemas futuros de rendimiento y en los propios equipos.

Con respecto a la corriente líquida resultante de mezclar las dos corrientes de colas de ambos separadores, esta tendrá una pureza en amoníaco del 99.6%. Es una pureza muy elevada, sin embargo, es importante analizar qué valor exigen las leyes vigentes y cuál es capaz de garantizar la competencia en el mercado. El Real Decreto 506/2013 (Real Decreto 506/2013, de 28 de junio, sobre productos fertilizantes) impone una normativa acerca de las propiedades que deben tener los productos fertilizantes. Para el caso de los fertilizantes producidos a partir de amoníaco anhidro, este debe contener un 80% de nitrógeno, lo que equivale a una pureza del 97.2%. Sin embargo, los proveedores de amoníaco en España lo comercializan con una pureza superior al 99.6%.

Por tanto, con el objeto de aumentar la pureza del amoníaco, se somete la corriente a un proceso de destilación, que permita obtener un flujo de amoníaco con una pureza superior al 99.9%, pudiendo así abarcar otros segmentos del mercado, como su uso como refrigerante.

Por último, es fundamental considerar cómo se va a almacenar el amoníaco producido hasta la hora de su salida de planta. Se diseñarán, por tanto, en el Apéndice C.1, los equipos donde se van a llevar a cabo el almacenamiento, para garantizar el suministro adecuado y que se cumplen las normas de seguridad y de calidad en vigor.

V.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

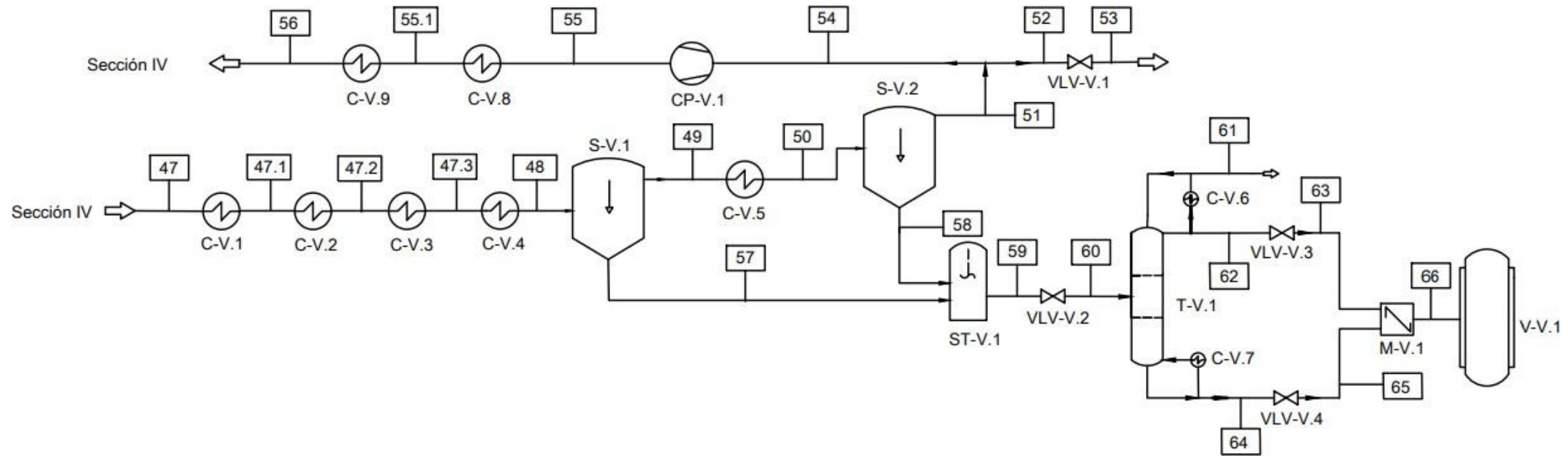


Fig. V. 2. Diagrama de flujo de la Sección V.

Separación del amoníaco		PLANO N° 5
Fecha	Autor	 Universidad de Oviedo
22/07/2025	Carmen Ana Rodríguez Menéndez	

Tabla V.1. Balances de materia y energía de la sección V. Corrientes 47-54.

Flujo másico (kg/h)	47	47.1	47.2	47.3	48	49	50	51	52	53	54
Nitrógeno	49 670	49 670	49 670	49 670	49 670	49 650	49 650	49 631	69	69	49 562
Hidrógeno	10 471	10 471	10 471	10 471	10 471	10 465	10 465	10 458	9.5	9.5	10 448
Amoniaco	16 878	16 878	16 878	16 878	16 878	13 322	13 322	2 226	806	806	1 420
Argón	158	158	158	158	158	157	157	154	0.97	0.97	153
Oxígeno	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.46 \cdot 10^{-3}$	$1.46 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$
TOTAL	77 177	77 177	77 177	77 177	77 177	73 594	73 594	62 469	885	885	61 584
T (°C)	417	280	160	80	25	25	-35	-35	-35	-35	-35
H (kJ/kg)	671.8	210.9	-189	-457.7	-700.3	-511.9	-891.9	-298.7	-298.7	-298.7	-298.7
P (kPa)	20 229	20 229	20 229	20 229	20 215	20 215	20 198	20 198	20 198	101.325	20 198

Tabla V.2. Balances de materia y energía de la sección V. Corrientes 55-66.

Flujo másico (kg/h)	55	55.1	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66
Nitrógeno	49 562	49 562	49 562	20	19.3	39.38	39.38	39.35	0	0	0.022	0.022	0.022
Hidrógeno	10 448	10 448	10 448	6	8	14	14	13.67	0	0	0.027	0.027	0.027
Amoniaco	1 420	1 420	1 420	3 566	11 095	14 651	14 651	0	1.43	1.43	14 650	14 650	14 651
Argón	153	153	153	1	3	4	4	0.94	0	0	2.89	2.89	2.89
Oxígeno	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$6.24 \cdot 10^{-6}$	$1.27 \cdot 10^{-5}$	$1.89 \cdot 10^{-5}$	$1.89 \cdot 10^{-5}$	$1.89 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0	0
TOTAL	61 584	61 584	61 584	3 583	11 125	14 708	14 708	54	1.43	1.43	14 653	14 653	14 654
T (°C)	-34.9	100	200	25	-35	-18	-13	-142	-142	-141.7	50	-33	-33
H (kJ/kg)	-297.8	184.5	518.6	-3 861	-4 171	-4 084	-4 084	-741	-4 666	-4 666	-3 797	-3 797	-4 666
P (kPa)	20 265	20 265	20 265	20 215	20 198	20 198	2 200	2 000	2 000	600	2 020	600	101.325

V.3. DISEÑO DE LAS ETAPAS DE SEPARACIÓN Y PURIFICACIÓN DEL AMONIACO

V.3.1. DESCRIPCIÓN DE LAS UNIDADES

V.3.1.1. Enfriamiento de la corriente de salida del reactor y primera condensación

Las condiciones óptimas de operación en el reactor requieren una elevada temperatura, por tanto, es necesario enfriar la corriente de salida de este (47), con el fin de conseguir la condensación del amoníaco. La temperatura en el condensador va a ser un parámetro determinante en la eficacia de la separación, ya que, a mayor cantidad de amoníaco condensado, mayor grado de separación de los reactivos no reaccionados gaseosos se va a poder conseguir. Esta se puede estimar observando la cantidad de amoníaco líquido que abandona por colas el separador de fases S-V.1, posterior al condensador C-V.4. En la Figura V.2, se muestra un caso de estudio llevado a cabo en Aspen HYSYS, donde se representa el flujo molar de amoníaco, por colas y cabezas del separador, frente a la temperatura a la que la mezcla abandona el condensador («Aspen HYSYS» 2019).

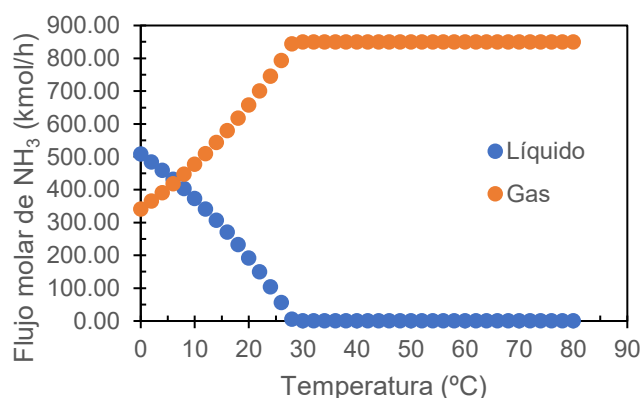


Fig. V.1. Flujo molar de NH₃ en las corrientes del separador S-V.1 en función de la temperatura.

En la Figura V.2, se puede ver que, por debajo de los 30 °C, la cantidad de amoníaco líquido que se obtiene por colas en el separador comienza a aumentar, debido a que comienza su condensación. Por el contrario, por cabezas la cantidad de amoníaco va disminuyendo a medida que realiza el cambio de fase. En la Tabla V-B.II, se comprueba que el punto de condensación del amoníaco, en esta mezcla concreta y bajo unas condiciones de presión próximas a los 20229 kPa, es 28 °C.

Se decide que la temperatura de condensación óptima va a ser 25 °C, ya que, permite obtener amoníaco condensado, empleando agua de red como refrigerante, considerando que se encuentra disponible a 15 °C, inicialmente. La diferencia de temperatura entre la entrada y la salida de la mezcla es muy elevada, y con ella, la cantidad de calor a intercambiar.

Además, en las últimas etapas, una vez que comienza el cambio de fase del amoníaco, existirá una mezcla gas-líquido que es necesario controlar de una manera más exhaustiva.

La instalación de un único cambiador de calor con esta diferencia de temperatura no sería un diseño realista, ya que, se necesitaría un área de intercambio de calor demasiado grande. Por otra parte, podría ser peligroso tratar de reducir tanto la temperatura en un único equipo, haciendo posible un choque térmico que conllevara a daños en los equipos o fugas que pueden ocasionar múltiples daños en el exterior.

Por todo ello, se decide instalar una serie de tres cambiadores de calor (C-V.1, C-V.2, C-V.3) que permitan reducir la temperatura progresivamente, pero sin alcanzar el punto de condensación y un último equipo donde tenga lugar la condensación (C-V.4).

V.3.1.2.Segunda etapa de condensación

Del mismo modo que antes, se lleva a cabo en Aspen HYSYS una simulación para representar el flujo de amoníaco obtenido a la salida del segundo separador S-V.2, tanto por colas como por cabezas, en función de la temperatura a la que la mezcla sale del condensador C-V.5, mostrada en la Figura V.3.

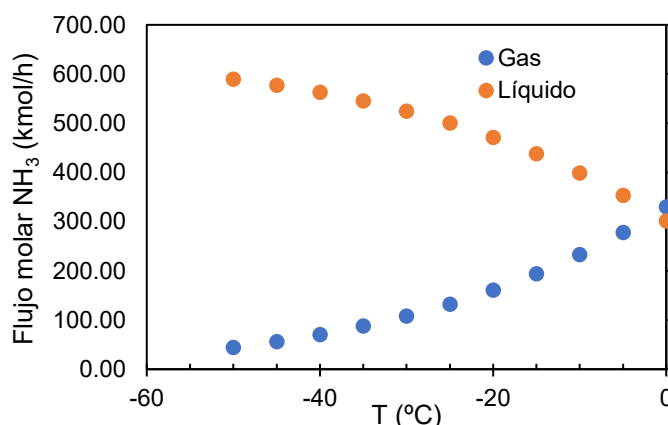


Fig. V.2. Flujo molar de amoníaco en las corrientes del separador S-V.2 en función de la temperatura del condensador C-V.5. (Aspen HYSYS)

De nuevo, cuanto menor es la temperatura de condensación, más amoníaco pasa a estado líquido y, por tanto, mayor cantidad de amoníaco recuperada en el separador S-V.2. En la Tabla V-B.2, aparecen todos los resultados de la simulación.

V.3.1.3.Separadores gas-líquido

Estos separadores son los equipos fundamentales de esta etapa, ya que, permiten separar el producto deseado en estado líquido.

En toda la etapa de condensación-separación, se mantiene una presión alta, considerando únicamente las caídas de presión en los condensadores, ya que, así, se favorece la separación.

Las corrientes de colas de ambos separadores se van a mezclar en un tanque agitado con un agitador de tipo hélice, para garantizar su homogenización tanto a nivel de composición como de temperatura. La corriente de cabezas del S-V.2 se divide en dos, una parte se recircula al reactor, tratando de no desperdiciar materias primas y, otra parte, se purgará a la atmósfera.

V.3.1.4. Torre de destilación

El amoniaco anhidro puede pertenecer a distintos grados en función de la pureza que tenga y en base a esto, puede destinarse a unos usos u otros.

Tal y como se comentó en la introducción, desde el punto de vista legal, el producto obtenido del S-V.2 serviría perfectamente para la producción de fertilizantes. Sin embargo, el estudio de mercado realizado muestra que la competencia oferta productos de mayor pureza, situándose el nuestro en un rango inferior. Por ello, se decide instalar una columna de destilación, que permita eliminar aquellos componentes que se mantienen junto al amoniaco, empobreciéndolo como trazas de hidrógeno, nitrógeno o argón en estado gaseoso.

V.3.2. ESTRATEGIA DE DISEÑO Y RESULTADOS

La separación del amoniaco de los reactivos no reaccionados y la recirculación de estos al reactor es imprescindible para reducir costes y evitar la pérdida de materias primas. Tanto la condensación parcial como el enfriamiento de una mezcla que contiene gases no condensables (H_2 , N_2 , Ar), no se afronta de la misma manera que si se tratara de una sustancia pura, ya que presenta una serie de complejidades durante la transmisión de calor y la transferencia de materia entre fases. Estos componentes crean una película de gas entre el vapor y la pared fría donde tiene lugar la condensación. Esto supone una nueva resistencia al transporte en la zona de condensación y que las propiedades de la mezcla no sean constantes, sino que varíen a lo largo del condensador (Colburn y Hougen 1934).

Sinnott y colaboradores sugieren unas reglas para seleccionar el método de diseño del condensador, en función de la cantidad de gases no condensables presentes. Debido a la baja conversión por paso del reactor, estos están en más de un 70% del contenido total; por lo tanto, se puede suponer que la convección forzada es el único mecanismo de transmisión de calor existente. En otras palabras, el vapor solo va a condensar si se produce la difusión a través del gas, y, por tanto, esta difusión la resistencia controlante (Sinnott 2005).

De una manera más detallada, se recogen las condiciones, propiedades y distintos resultados para todos los cambiadores de calor, en la Tabla V-B.VI.

V.3.2.1.Refrigeración en cambiadores C-V.1, C-V.2 y C-V.3

El enfriamiento en etapas se va a llevar a cabo en intercambiadores de calor de carcasa y tubos, ya que, este tipo ofrece múltiples posibilidades de diseño y así, se podrá maximizar la transferencia de energía entre el fluido frío y el caliente. Para los cambiadores C-V.1 y C-V.2, como fluido refrigerante, se decide utilizar un aceite térmico, el Therminol 68 de la marca Eastman. Una vez que la temperatura se encuentra por debajo de los 200 °C, en el cambiador C-V.3, se decide emplear agua como fluido de refrigeración, para ahorrar costes.

Ante esta situación se puede trabajar de dos formas diferentes:

Si no se desea que el cambio de fase del amoníaco se produzca en el interior del cambiador de calor, esta corriente se introduce por los tubos, ya que, está a elevada presión y, el amoníaco y el hidrógeno pueden dañar los materiales por corrosión o difusión, siendo más fáciles de limpiar los tubos que la carcasa. Por el contrario, si se desea aumentar el enfriamiento y que se produzca el cambio de fase en el cambiador, sería mejor introducir la corriente de amoníaco por la carcasa, para evitar que los gases no condensables que contiene la mezcla ocasionen problemas e ineficiencia térmica. A priori, se decide trabajar sin cambio de fase en el interior del cambiador, por lo que el agua de refrigeración circulará por la carcasa. (Branan 2005)

Se establecen tres tramos de temperatura, de forma que la diferencia de temperatura sea similar en los tres, y para cada uno de ellos, se calcula la cantidad de calor que es necesario retirar de la mezcla caliente, empleando la Ecuación I.20.

Este calor retirado es el mismo que debe absorber el fluido refrigerante, considerando las pérdidas despreciables, por ello, conociendo este valor y, suponiendo que el aceite entra al sistema a una temperatura suficiente para garantizar su fluidez y que, como máximo va a experimentar un incremento de su temperatura de 80 °C, se calcula el flujo necesario de refrigerante. El proveedor aporta valores de la capacidad calorífica del aceite para distintas temperaturas, en el caso de 200 °C, esta toma un valor de 1.87 kJ/kg °C («Therminol 68 Heat Transfer Fluid» 2015).

Mientras que, para el agua, es de 4.18 kJ/kg °C. El agua de refrigeración se va a introducir a 15°C y su incremento de temperatura no debe superar en gran medida los 20°C según las reglas heurísticas (Walas 1988), por tanto, se supone que esta va a abandonar el

cambiador a unos 35°C. Los valores de flujo másico de refrigerante necesario para intercambiar una cierta cantidad de calor vienen reflejados en la Tabla V.3.

Tabla V.3. Condiciones de los cambiadores C-V.1, C-V.2 y C-V.3

Equipo	Fluido refrigerante	ΔT_c (°C)	ΔT_H (°C)	$\dot{m}_c$ (kg/h)	$\dot{m}_H$ (kg/h)	Q (kW)
C-V.1	Therminol 68	80	137	202 118	77 177	9971
C-V.2	Therminol 68	80	120	203 564	77 177	8595
C-V.3	Agua	20	80	246 597	77 177	5727

A continuación, se resuelven las ecuaciones I.21 y I.22 con el fin de calcular el área de intercambio necesario en cada uno de los cambiadores. El valor del coeficiente global de transferencia de calor se encuentra entre los 50 y los 150 W/m²K para el caso de enfriar gases con aceite térmico. Se toma $U=120$ W/m²K, como un valor conservador, ya que, no es concreto para el caso en cuestión (Tempco 2011).

Por otro lado, para el agua, el coeficiente global de transmisión de calor puede tomar valores muy diferentes, por tanto, se toma uno intermedio de 150 W/m²K («Perry S Chemical Engineers Handbook Mc Graw Hill 8th Ed 2008» 2008).

Las áreas de los cambiadores C-V.1, C-V.2 y C-V.3 son, respectivamente, 566.6, 602.5 y 416 m².

V.3.2.2. Condensación parcial del amoníaco en el condensador C-V.4

V.3.2.2.1. Consideraciones previas

Los condensadores, C-V.4 y C-V.5, serán intercambiadores de calor de carcasa y tubos. Por los tubos, circulará el fluido refrigerante y la mezcla, previamente enfriada, por la carcasa, ya que, se recomienda que el fluido a condensar atraviese la carcasa para maximizar el intercambio de calor (Walas 1988).

En el equipo C-V.4, ya que no es necesario alcanzar temperaturas inferiores a 0 °C y la presión es muy elevada, se puede emplear agua como medio de refrigeración, proveniente de red, a unos 15 °C en promedio anual (Inamuddin, Boddula y Asiri 2020). El flujo será en contracorriente para conseguir una mayor eficacia de transmisión y los tubos se dispondrán en forma triangular, de modo que se maximice el área de intercambio. La disposición del equipo será horizontal, ya que, favorecen la condensación de vapores a presión elevada, con un único paso por tubos y placas deflectoras en el lado de la carcasa (Peters et al. 2004).

V.3.2.2.2. Optimización de la temperatura en el condensador

Con el objetivo de minimizar el tamaño necesario de intercambiador, así como, maximizar la transferencia de calor, se realiza la simulación del proceso de condensación parcial en Aspen HYSYS para conocer las condiciones de operación óptimas. En las Figuras V.4 y V.5 se muestra la energía requerida por el condensador para alcanzar una determinada temperatura y el producto UA del cambiador.

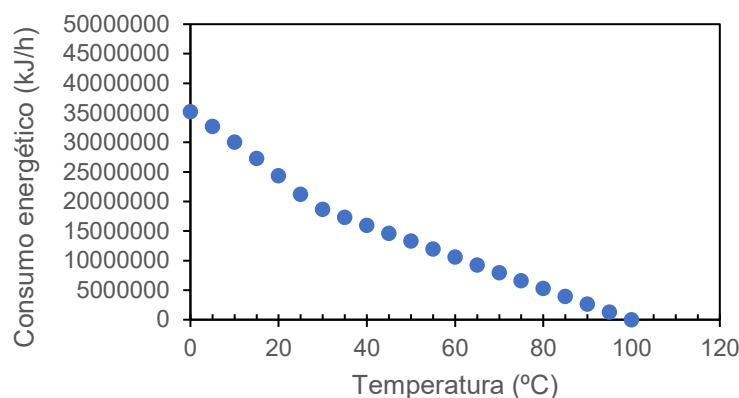


Fig. V.3. Consumo energético del condensador C-V.4 en función de la temperatura.

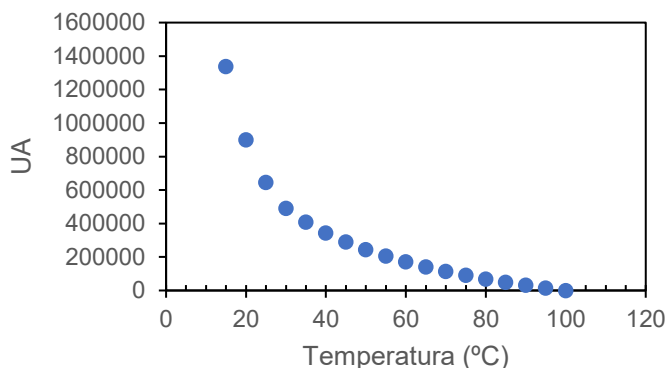


Fig. V.4. Variación del coeficiente global de transmisión de calor UA de C-V.4 en función de la temperatura.

Se puede observar como el consumo aumenta de una manera más abrupta a partir de los 25°C y, además, como era de esperar, a medida que disminuye la temperatura, se requiere más área de contacto, lo que implica un equipo de mayor tamaño y consumo energético. Dado que tanto en la Figura V.4 como en la V.5 se observa un cambio de tendencia en torno a los 25 °C, se decide que esta será la temperatura óptima en el condensador, para conseguir una buena separación, minimizando tanto el tamaño del equipo y, por ello, los costes fijos, como los requerimientos energéticos.

V.3.2.2.3. Diseño térmico del condensador C-V.4

Primero se realiza un balance de energía al fluido caliente y al refrigerante, al igual que antes, empleando la Ecuación I.20, para obtener la cantidad de calor sensible intercambiada, como se muestra a continuación. Los datos y propiedades de las distintas corrientes, tales como, capacidad calorífica de la mezcla, densidad y viscosidad, se obtienen de la simulación llevada a cabo en Aspen HYSYS.

Al producirse un cambio de fase, además del calor sensible propio que cede la mezcla a medida que disminuye su temperatura, también se producirá transmisión de calor latente, Para el calor sensible se tiene en cuenta la capacidad calorífica tanto de los gases no condensables como del vapor, ya que, toda la mezcla se va a enfriar. Por otro lado, en cuanto al calor latente, solo se aplica al vapor que está en una gran minoría frente a los gases no condensables, por tanto, se estima un porcentaje del total que consigue condensar:

$$Q_{H_{latente}} = \dot{m}_{vap} \cdot \lambda = \dot{m}_H \cdot \% \text{ condensado} \cdot \lambda \quad [V.1]$$

Siendo:

$\dot{m}_{vap}$: flujo másico del vapor condensado (kg/h)

λ : calor latente de condensación (kJ/kg)

Para calcular el flujo másico de vapor condensado, se realiza una simulación en Aspen HYSYS, y se observa que condensan 259.4 kmol/h o 4356 kg/h, lo cual supone una fracción vaporizada de 0.968 en base molar y 0.94 en masa.

Se puede estimar la presión parcial del amoníaco aplicando la Ley de Raoult, a partir de su fracción molar de 0.12 y siendo la presión total 202 bar, que resulta de 24.24 bar. A continuación, se obtiene la temperatura de saturación del amoníaco a esa presión, 59.78 °C y, el calor latente de condensación, -1015.88 kJ/kg. (Haar y Gallagher 1978)

Con todo esto, se calcula el calor transferido por el fluido caliente, que engloba, el calor sensible, que se calcula con la Ecuación I.20 y el calor latente, con la Ecuación V.2.

$$Q_H = Q_{H_{sensible}} + Q_{H_{latente}} \quad [V.2]$$

La mezcla caliente va a ceder 2508.6 kW, considerando el descenso de temperatura y el cambio de fase. Ahora, se repite el procedimiento seguido anteriormente para el cambiador C-V.3, para estimar la cantidad de refrigerante necesario.

Tabla V.4. Condiciones de las corrientes caliente y fría del cambiador C-V.4.

Fluido	T entrada (°C)	T salida (°C)	Cp (kJ/kg°C)	Flujo (kg/h)
Caliente	80	25	3.39	77 117
Frío	15	35	4.18	108 027

Para estimar el área de intercambio de calor se utiliza la ecuación básica de diseño de cambiadores de calor, Ecuación I.21, con una pequeña modificación, ya que, en este cambiador va a haber múltiples pasos por tubos, lo cual hace que se desvíe de la idealidad y sea necesario considerar un factor de corrección, F.

$$Q = U \cdot A \cdot F \cdot \Delta T_{lm} \quad [V.3]$$

F depende de dos parámetros R y P, que se calculan a partir de las temperaturas de entrada y salida de ambos fluidos, mostradas en la Tabla V.4.

$$R = \frac{T_i - T_o}{T_o' - T_i'} \quad [V.4]$$

$$P = \frac{T_i - T_o}{T_i - T_i'} \quad [V.5]$$

Donde:

T: temperatura del fluido que circula por los tubos (°C)

T': temperatura del fluido que circula por la carcasa (°C)

Subíndice 'i': entrada y subíndice 'o': salida

Los resultados son R=0.36, P=0.31. Con estos valores se acude a la Figura V.6 de cambiadores de pasos múltiples 1:2, se lee en el eje de abscisas el valor de P y en isolíneas R, para así, obtener F en el eje de ordenadas.

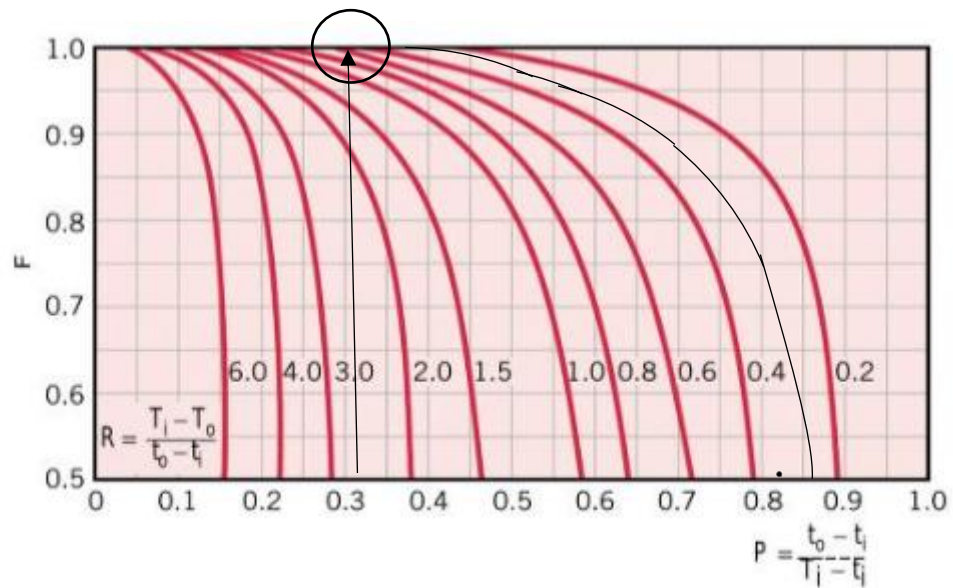


Fig. V.5. Factor de corrección de la temperatura para un cambiador 1:2.

En la Figura V.6, se puede ver que el factor de corrección está en torno a la unidad, lo cual es correcto ya que, este debe ser superior a 0.8. («Fundamentals Of Heat And Mass Transfer Frank P Incropera» 2007)

Se utiliza la Ecuación 1.22 para estimar la una diferencia de temperatura media logarítmica, que resulta de 23.27 °C.

- Tubos:

La parte más compleja del diseño de un cambiador es la estimación del coeficiente global de transmisión de calor ya que depende de múltiples variables. Como ya se mencionó anteriormente, se van a considerar las correlaciones de convección forzada, suponiendo que la mezcla fluye por el exterior de los tubos y el agua por el interior. Por tanto, primero, se calcula el régimen de flujo a partir del número de Reynolds. También se calcula el número adimensional de Prandtl y el factor de fricción f , de modo que se pueda estimar el número de Nusselt, empleando la correlación de Gnielinski (Ecuación V.6).

$$Nu_D = \frac{\left(\frac{f}{8}\right)(Re_D - 1000) Pr}{1 + 12.7 \left(\frac{f}{8}\right)^{\frac{1}{2}} (Pr^{\frac{2}{3}} - 1)} \quad [V.6]$$

Esta correlación es apropiada para valores de Prandtl entre 0.5 y 2000 y para Reynolds entre 3000 y $5 \cdot 10^6$. Para calcular el número de Reynolds, es necesario conocer el diámetro interno de los tubos por donde va a circular el agua.

En base a las medidas estándar recomendadas, se decide que el diámetro de estos sea de $1.483 \cdot 10^{-2}$ m, de cara a calcular el Reynolds y, posteriormente, el número de Prandtl. Para el cálculo del número de Nusselt es necesario conocer el valor del factor de fricción. Existen gráficas que permiten estimarlo, como el Diagrama de Moody, sin embargo, para esta correlación de Nusselt, se recomienda emplear la expresión mostrada en la Tabla V.5. Las propiedades físicas necesarias para realizar los cálculos extraídas de la bibliografía, (Cengel 2018), a la temperatura media del fluido (25 °C), así como los diferentes números adimensionales se muestran en la Tabla V.5.

Tabla V.5. Propiedades térmicas y números adimensionales para la mezcla gaseosa.

Diámetro interno tubos (m)	0.01483
Flujo másico (kg/s)	30.01
Viscosidad dinámica (Pa s)	$1.31 \cdot 10^{-5}$
Capacidad calorífica (kJ/kg°C)	3.40
Conductividad térmica (W/m K)	0.61
Reynolds $Re = \frac{4 \dot{m}}{\pi D \mu}$	$2.89 \cdot 10^6$
Prandtl $Pr = \frac{c_p \mu}{k}$	6.13
Factor de fricción $f = (0.79 \ln Re - 1.64)^{-2}$	$9.78 \cdot 10^{-3}$
Nusselt	$1.03 \cdot 10^4$

El valor del número de Nusselt permite estimar el coeficiente de transmisión de calor convectivo en el interior de los tubos utilizando la siguiente expresión.

$$h_i = \frac{Nu \cdot k}{D_{int}} \quad [V.7]$$

Este da como resultado un valor de h para el interior de los tubos de $4.2 \cdot 10^5$ W/m²K.

- Carcasa:

Calcular el coeficiente de transmisión de calor por convección en el lado de la carcasa implica una mayor complejidad ya que, en cambiadores de paso múltiple, generalmente, en la carcasa se instalan unos deflectores o 'baffles' con el fin de aumentar la turbulencia en el flujo y por tanto, el intercambio de calor. Estos se deben situar a una distancia que permita velocidades de vapor altas y así disponer de elevados coeficientes de transmisión de calor sensible. (Sinnott y Towler 2019).

Otra de sus funciones es reducir las vibraciones de los tubos, actuando de soporte de estos, en cierta medida. Por consiguiente, estos deflectores imponen una resistencia adicional. Por tanto, para calcular h_o (subíndice 'o' para parte exterior de los tubos e 'i' para el interior de estos), se recurre a la Ecuación V.8, que contiene una serie de parámetros característicos de la carcasa.

$$\frac{h_o D_e}{k} = 0.36 \left(\frac{D_e G_s}{\mu} \right)^{0.55} (Pr)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\mu}{\mu_s} \right)^{0.14} \quad [V.8]$$

Donde:

k : conductividad térmica (W/m K)

μ : viscosidad dinámica (kg/m s)

μ_s : viscosidad del agua a la temperatura de la pared del tubo

Pr : número de Prandtl

El resto de los términos se irán desarrollando a continuación.

El término del cociente entre viscosidades, solo se debe calcular cuando la variación del fluido es muy grande, en este caso, ya que se ha fijado una diferencia máxima de 20°C, se va a despreciar ese término. La viscosidad dinámica y la conductividad térmica se obtienen de Aspen HYSYS, cuyos valores son $1.12 \cdot 10^{-5}$ Pa·s y 0.12 W/m K, respectivamente. Con estos valores y teniendo en cuenta que la capacidad calorífica de la mezcla bajo estas condiciones es de 3.5 kJ/kg °C, se obtiene un valor de Prandtl de 0.38.

Por otra parte, se calcula la densidad de flujo másico G_s , realizando el cociente del flujo másico entre el área de la carcasa, a_s . Para hallar este valor es necesario conocer una serie de parámetros de diseño del cambiador.

Para empezar, el cambiador, según la nomenclatura de las normas TEMA, se decide que sea de tipo AET. Cada letra quiere decir una característica diferente sobre el cambiador (Brogan 2011).

- A: cabezal delantero del cambiador desmontable.
- E: un paso por carcasa.
- T: cabezal trasero desmontable, lo cual facilita el mantenimiento y la limpieza, así como la tolerancia a la expansión térmica.

El área de la carcasa a_s , se puede calcular por medio de la siguiente ecuación:

$$a_s = \frac{D_s C B}{Pitch} \quad [V.9]$$

Para resolver la Ecuación V.9, se hacen una serie de estimaciones en base a la información disponible acerca del diseño estándar de un cambiador en la bibliografía (Byrne 2025).

D_s : diámetro de la carcasa (m)

C : distancia entre la superficie de los tubos (m)

B : espacio mínimo entre los baffles (m)

C se puede calcular adicionando el 25% del diámetro externo de los tubos, mientras que, B puede tomar un valor entre el 50% y el 100% del tamaño total del diámetro de la carcasa, por tanto, se elige el 80%. Este diámetro de carcasa, típicamente, tiene un valor entre 60 y 2000 mm, en este caso, se decide que tenga un valor de 99 mm (39 in, estandarizado). («Shell-and-tube heat exchangers. Standard series and customer oriented solutions»)

Por otra parte, se decide que la disposición de los tubos sea en arreglo triangular, tal y como se muestra en la Figura V.7, con el fin de aumentar la turbulencia, y con esto la transferencia de calor.

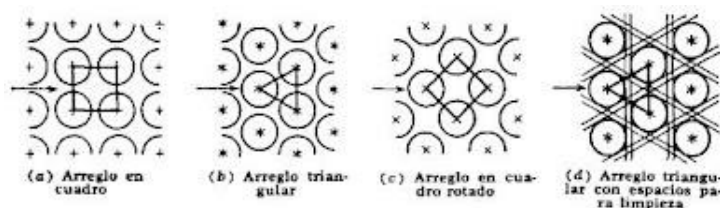


Fig. V.6. Posibles arreglos de tubos.(Egusquiza 2011)

La distancia entre los ejes de los tubos se denomina 'pitch' y se estima que tiene un valor de 2.54 cm. A continuación, únicamente queda por conocer el diámetro externo de los tubos, D_e , el cual se puede calcular con la Ecuación V.10.

$$D_e = \frac{4 (0.43 \text{ Pitch}^2 - 0.3927 D_o^2)}{0.5 D_o \pi} \quad [\text{V.10}]$$

En la Tabla V.6, se hace una recapitulación los resultados de todas estas dimensiones y parámetros de diseño, así como el coeficiente de transmisión de calor por convección h_o .

Tabla V.6. Dimensionado de la carcasa.

Parámetro	Valor
Diámetro de carcasa (m)	0.99
Diámetro externo tubos (m)	$1.905 \cdot 10^{-2}$
Distancia entre superficie de tubos, C (m)	$2.4 \cdot 10^{-2}$
Espacio mínimo entre baffles, B (m)	$7.92 \cdot 10^{-2}$
Pitch (m)	$2.54 \cdot 10^{-2}$
Área transversal carcasa, a_s (m ²)	0.74
Flujo másico (kg/h)	8 006.39
G_s (kg/hm ²)	102 804.14
D_e (m)	$1.803 \cdot 10^{-2}$
h_o (W/m ² K)	572.667

De la bibliografía, también se pueden obtener valores estándar o recomendados para la longitud de los tubos en base al diámetro de estos. Para el caso de un diámetro estándar de 0.01905 m, la longitud de tubo recomendada es de 4.8768 m (Peters et al. 2004). Esta longitud de tubo puede aproximarse a la longitud de la carcasa, para estimar los cálculos del número de deflectores, dividiendo esta longitud total por la distancia entre deflectores (B). En este caso, el número de deflectores obtenido es 6.

Por último, se tienen en cuenta las resistencias que se oponen a la transmisión de calor. Una de ellas es derivada del propio material y la posibilidad de generarse incrustaciones o ensuciamiento en el cambiador, disminuyendo su eficiencia térmica, en este caso, la condensación de amoníaco empleando agua, tiene el mismo valor para dentro y fuera de los tubos, de $0.001 \text{ m}^2\text{°C/W}$. (Walas 1988)

El área externa a los tubos, A_o , se calcula de manera idéntica al área interna, A_i , solamente es necesario emplear el diámetro exterior o interior de los tubos, respectivamente, utilizando la Ecuación V.11.

$$A_o = \pi D_o L_{tubo} \quad [\text{V.11}]$$

Resultando el área interna, A_i , de 0.23 m^2 y la externa, de 0.29 m^2 .

Estimación de U:

A continuación, se procede a realizar los cálculos del diseño térmico. El coeficiente global de transmisión de calor U depende de los coeficientes individuales h y estos a su vez, dependen del área de intercambio y de la velocidad.

Entonces el método a seguir es el siguiente: una vez seleccionado un tipo de cambiador de calor y sus dimensiones estándar recomendadas, se calcula el área, la velocidad, el número de tubos, suponiendo un valor de U . Se recalculan los números adimensionales y, por consiguiente, el coeficiente de transmisión de calor por convección interior, h_i . Por otro lado, se calculan todos los valores que se han ido describiendo a lo largo de este apartado y empleando la Ecuación V.12, se obtiene el coeficiente U del cambiador (Incropera 2013).

$$\frac{1}{U} = \frac{R_{f_i}}{A_i} + \frac{R_{f_o}}{A_o} \cdot \frac{1}{h_o} + \frac{\ln\left(\frac{D_o}{D_i}\right)}{2 \pi k_{material} L_{tubo}} + \frac{1}{h_i} \cdot \frac{A_o}{A_i} \quad [V.12]$$

La conductividad térmica del Inconel 625 tiene un valor aproximado de 9.8 W/m K (Special Metals Corporation 2013)

El siguiente paso consiste en comparar el valor supuesto con el calculado. Cuando la diferencia entre ambos es notoria, se debe continuar la iteración, rehaciendo los cálculos. En el primer cálculo se parte de un valor de U extraído de la literatura, pero, para los sucesivos, como suposición inicial se considera el anterior U calculado con la Ecuación V.12. En la Tabla V-b.4, se encuentran todos los resultados obtenidos para cada una de las iteraciones llevadas a cabo. En el momento en que la diferencia entre el coeficiente global de transmisión de calor supuesto y calculado es del orden de 10^{-5} , se cesa la iteración, ya que pueden considerarse prácticamente idénticos. El área de intercambio, A , se calcula con la Ecuación V.3 y el número de tubos, mediante la relación entre esta área A y la externa a los tubos, A_o . De forma que se obtienen los siguientes resultados:

- Coeficiente global de transmisión de calor U : 253.20 W/m²K
- Área de intercambio de calor: 426 m²
- Número de tubos: 1459

- Cálculo de la caída de presión en el interior de los tubos:

A continuación, se calcula la caída de presión derivada de la fricción en el interior de cada uno de los tubos, empleando la Ecuación V.13. Para ello, es necesario conocer el número de Reynolds esta vez considerando el diámetro interno de los tubos. En función del régimen dado por el número de Reynolds, se calcula un nuevo factor de fricción.

$$\frac{\Delta P}{\rho} = v_t^2 \cdot f_t \cdot \frac{L_{tubo}}{D_i} \quad [V. 13]$$

- Cálculo de la caída de presión en la carcasa:

Para calcular las pérdidas de fricción en el lado de la carcasa, se debe introducir el diámetro hidráulico para una disposición de los tubos en arreglo triangular. Este se puede calcular con la Ecuación V.14. Al igual que para los tubos, con este nuevo diámetro se calcula, el área libre para que la mezcla fluya por la carcasa A_c , con la Ecuación V.15. Conocida la velocidad, se calcula el número de Reynolds, para hallar así el factor de fricción y, finalmente, la caída de presión, mediante la Ecuación V.16.

$$D_h = \frac{2 \text{ Pitch } (\text{Pitch} - D_o)}{\text{Pitch} + D_o} \quad [V.14]$$

$$A_c = D_{\text{carcasa}} \cdot (\text{Pitch} - D_o) \quad [V.15]$$

$$\frac{\Delta P}{\rho} = \frac{f_c G_s^2 D_c (N^\circ \text{ deflectores} + 1)}{2 D_e \rho^2} \quad [V.16]$$

En la Tabla V.7 se recogen los resultados de los cálculos para la carcasa y los tubos.

Tabla V.7. Cálculo de la caída de presión en los tubos y en la carcasa del C-V.4.

	$A_t \text{ (m}^2\text{)}$	$v_t \text{ (m/s)}$	Re_t	f_t	$\Delta P/\rho \text{ (m}^2\text{/s}^2\text{)}$	Densidad (kg/m ³)
TUBOS	0.25	0.12	$1.98 \cdot 10^6$	$1.038 \cdot 10^{-2}$	$4.9 \cdot 10^{-2}$	997
	$A_c \text{ (m}^2\text{)}$	$v_c \text{ (m/s)}$	Re_c	f_c	$\Delta P/\rho \text{ (m}^2\text{/s}^2\text{)}$	Densidad (kg/m ³)
CARCASA	$6.35 \cdot 10^{-2}$	52.97	$1.9 \cdot 10^6$	$1.04 \cdot 10^{-2}$	$4.15 \cdot 10^{-1}$	63.74

Conocida la caída de presión en ambos lados, con la Ecuación V.17 se calcula el cómputo global, considerando las densidades mostradas en la Tabla V.7, y el número de tubos calculado anteriormente. La caída de presión total en el condensador C-V.4 es de 14 kPa.

$$\frac{\Delta P}{\rho} = \left(\frac{\Delta P}{\rho} \right)_{\text{tubos}} \rho_{\text{agua}} N_{\text{tubos}} + \left(\frac{\Delta P}{\rho} \right)_{\text{carcasa}} \rho_{\text{mezcla}} \quad [V.17]$$

En resumidas cuentas, se van a necesitar unos 108.4 m³/h de agua de refrigeración y un cambiador de carcasa y tubos, con un área de intercambio de calor de 426 m² y 1459 tubos, que ocasiona una caída de presión de 14 kPa.

V.3.2.2.4. Diseño térmico del condensador C-V.5

Para aumentar la cantidad de amoníaco condensado, se decide instalar un segundo sistema condensador-separador, reduciendo aún más la temperatura mientras que la presión se mantiene alta. En esta segunda etapa será necesario bajar la temperatura por debajo de los 0 °C. En las Figuras V.8 y V.9, se muestra la variación de la fracción molar en las dos corrientes generadas en el separador y el consumo energético del condensador.

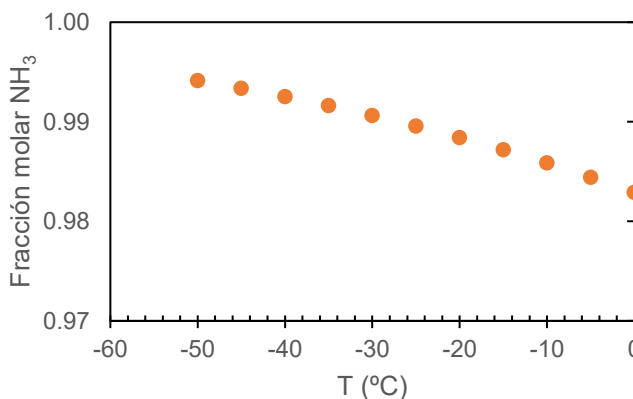


Fig. V. 7. Fracción molar de NH_3 en las corrientes del segundo separador flash S-V.5.

En este segundo separador, como se puede ver en la Figura V.8, a medida que disminuye la temperatura, aumenta la pureza de la corriente de amoníaco líquido, si bien, las variaciones son pequeñas por estar dicha pureza ya muy próxima a la unidad. Puesto que nos interesan purezas por encima del 99%, lo ideal sería bajar la temperatura por debajo de -30 °C. Sin embargo, la Figura V.9, muestra cómo, evidentemente, el consumo energético crece progresivamente a medida que disminuye la temperatura.

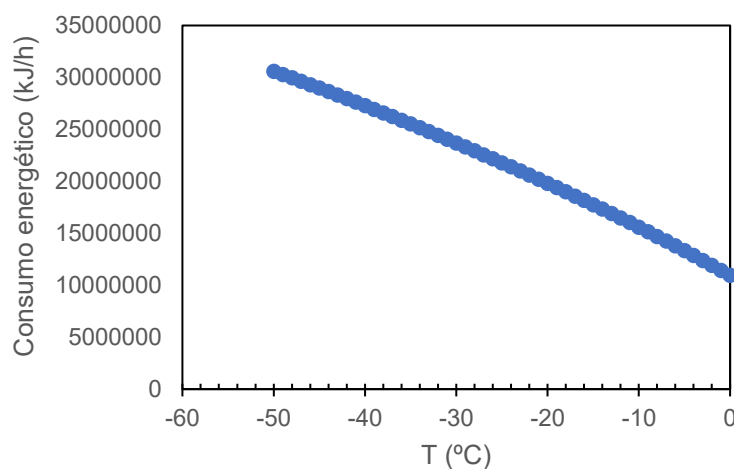


Fig. V.8. Consumo del condensador C-V.5 frente a la temperatura.

Por tanto, para decidir cuánto debe disminuir la temperatura, se observa el flujo obtenido por cabezas (vapor) y colas (líquido) del segundo separador, para tratar de maximizar la producción del amoníaco líquido, mostrado en la Figura V.10.

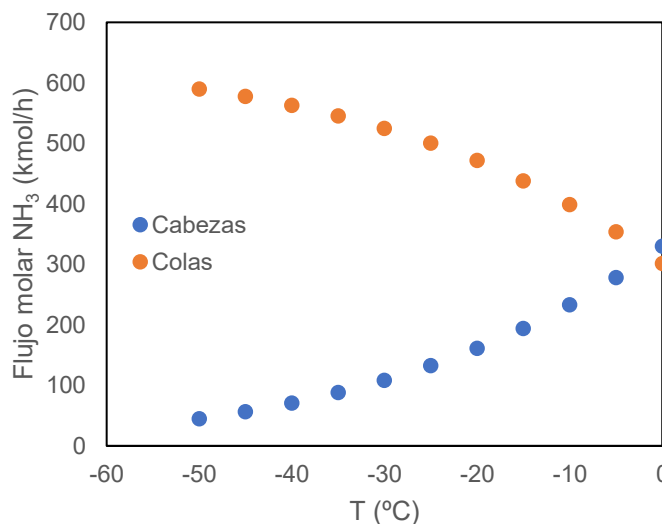


Fig. V.9. Flujo molar del amoníaco en el segundo separador.

Analizando ventajas y desventajas, se decide disminuir la temperatura hasta $-35\text{ }^{\circ}\text{C}$, para optimizar la producción, sin aumentar desmesuradamente el consumo energético del condensador. El diseño del condensador C-V.5 se realiza de manera idéntica a este, considerando también un cambiador de calor de carcasa y tubos AET, con las mismas dimensiones. Como refrigerante se empleará propilenglicol diluido en agua (al 60% consigue elevar el punto de congelación del agua hasta los $-48\text{ }^{\circ}\text{C}$). Para realizar una estimación del área de intercambio, se supone que el coeficiente global de calor tiene un valor de $500\text{ W/m}^2\text{K}$ (Branan 2005).

Al llevar a cabo la simulación de la condensación parcial en HYSYS, se obtiene que el flujo de condensado es de 11180 kg/h . Por tanto, el área de C-V.5 es de 173.4 m^2 .

Se puede apreciar que el primer condensador requiere un mayor área de intercambio para llevar a cabo la condensación, sin embargo, la cantidad licuada es inferior que en el segundo, ya que, la temperatura alcanzada es menor.

V.3.2.3. Separadores Gas-Líquido (S-V.1 y S-V.2)

El recipiente se va a colocar de manera vertical con el objetivo de maximizar la separación de las fases presentes en la mezcla. Se alimenta una mezcla líquido-vapor en equilibrio (F, z) y por diferencia de densidad se obtienen dos corrientes, una por cabezas con los componentes más volátiles (V, y), en fase gas, y otra por colas, en fase líquida, rica en los componentes menos volátiles, en este caso, el producto buscado, el amoniaco (L, x). (Walas 1988)

De esta forma, se realizan los balances de materia al separador, que permiten obtener la composición gas y líquida de cada componente, empleando un parámetro común a ambas fases, la fracción vaporizada (V/F). Otro parámetro fundamental es la constante de equilibrio líquido-vapor (K_i), que permite relacionar la composición del líquido y del vapor de un componente, mediante la Ley de Raoult, o, en caso de no ser ideal, términos de fugacidad. Estos valores se obtienen del programa Aspen HYSYS, empleando el modelo termodinámico Peng-Robinson.

$$\text{Balance de materia global: } F = L + V$$

$$y_i = K_i x_i \quad [\text{V.18}]$$

$$FZ_i = Vy_i + Lx_i \Rightarrow VK_i x_i + Lx_i \Rightarrow \frac{FZ_i}{F} = \frac{V}{F} K_i x_i + \frac{F-V}{F} x_i$$

$$x_i = \frac{Z_i}{\frac{V}{F}(K_i - 1) + 1} \quad [\text{V.19}]$$

$$y_i = \frac{K_i Z_i}{\frac{V}{F}(K_i - 1) + 1} \quad [\text{V.20}]$$

Para hallar la fracción vaporizada, se utiliza la ecuación de Rachford-Rice que se muestra a continuación con la Ecuación V.21 (Henley y Seader 2003)

$$f(\psi) = \sum_{i=1}^c \frac{z_i(1 - K_i)}{1 + \psi(K_i - 1)} = 0 \quad [\text{V.21}]$$

Donde $\psi = V/F$, es decir, la fracción vaporizada.

Se aplica la ecuación para cada uno de los componentes, conociendo la fracción molar de la alimentación y los valores de la constante K y, por último, se hace el sumatorio total de estas. La fracción vaporizada se sitúa en una celda aleatoria vacía y con la herramienta Solver

de Excel, se impone como celda objetivo que el antes mencionado sumatorio sea cero, variando ψ . De este modo, se obtiene que la fracción vaporizada tiene un valor de 0.968. Se puede comprobar, por tanto, que en el apartado V.3.2.1.3., la fracción vaporizada obtenida en la simulación concuerda con este resultado.

Con la fracción vaporizada, se aplican las ecuaciones V.19 y V.20, para obtener la composición de la fase líquida y vapor de las cinco especies en cuestión, así como el flujo molar que sale por cabezas, V , conociendo el flujo de alimentación F , 8006 kmol/h. En la Tabla V-b.1, se recogen los resultados obtenidos. A partir de la fracción vaporizada, se obtiene un flujo de líquido de 259.1 kmol/h y de vapor de 7747.3 kmol/h.

Conocidos los flujos y las composiciones, se procede a realizar el dimensionado del separador. Primero, se emplea la Ecuación I.10, de Souders-Brown, para estimar la velocidad máxima del gas en el separador. Se obtiene una velocidad máxima del gas, u , de 0.28 m/s.

En esta ecuación aparece k , que es una constante que puede tomar distintos valores, entre 0.1 y 0.35 ft/s, en función de si en el separador se instala una malla metálica, que permita aumentar la eficiencia de separación. En este caso, se decide usar esta malla (mesh de-entrainer), cuyo diseño se abordará más adelante, por tanto, la constante del tambor tomará un valor de 0.35 ft/s (0.107 m/s). (Walas 1988)

A continuación, se sigue el procedimiento de dimensionado propuesto por Watkins para el dimensionado del separador. Primero, se calcula el área de paso disponible necesaria para que el vapor abandone el separador por cabezas, con la Ecuación V.22.(Wankat y González y Pozo 2008)

$$A_c = \frac{V M_w}{u \rho_v} = \frac{(7747.3 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}}) 9.42 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{0.28 \frac{\text{m}}{\text{s}} 73.81 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 0.98 \text{ m}^2 \quad [\text{V.22}]$$

Una vez conocida el área, se puede calcular el diámetro del separador, empleando la Ecuación V.23. En las heurísticas aparece que la relación óptima entre altura y diámetro del tanque es 3, por tanto, también se puede estimar la altura óptima. (Walas 1988)

$$D = \sqrt{\frac{4 A_c}{\pi}} \quad [\text{V.23}]$$

De la Ecuación V.23 se obtiene un diámetro de 1.12 m para el separador y, por consiguiente, una altura de 3.35 m. Esta altura global se puede desglosar en distintos términos tal y como se muestra en la Figura V.11.

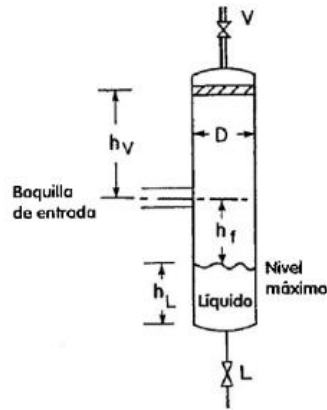


Fig.V.10. Estimación de la altura del separador.

La literatura (Wankat y González y Pozo 2008) determina que el espacio libre entre el nivel del líquido en la parte inferior y la entrada de materia al separador, h_f , debe ser, al menos, de 18 pulgadas (0.4572 m). Por otra parte, la altura del líquido, h_L , se puede estimar relacionando el volumen necesario en el separador para contener el golpe del líquido sin arrastrar parte del gas con la sección transversal del tanque cilíndrico, mediante la siguiente expresión:

$$h_L = \frac{V_{golpe}}{\pi D_{separador}^2 / 4} \quad [V.24]$$

Para calcular el volumen necesario para contener el golpe de líquido, se debe conservar un margen de seguridad, considerando como mínimo un 20% adicional sobre el volumen de retención del líquido. («Slug Catcher Multiphase CFD Modeling» 2016)

Por otra parte, para lograr una mayor separación, se estima que el tiempo de retención necesario puede rondar los 5 minutos. (Walas 1988)

$$V_{retención} = Flujo_{liq} t_{retención} = \frac{259.1 kmol}{h} \cdot \frac{16.81 kg}{kmol} \cdot 5 min \cdot \frac{1 h}{60 min} = 0.61 m^3 \quad [V.25]$$

$$V_{golpe} = 1.2 V_{retención} = 0.504 m^3$$

De este modo, ya se podría calcular la altura del líquido h_L , con la Ecuación V.24. Únicamente quedaría por conocer la altura del vapor, que se puede obtener teniendo en cuenta, de nuevo, la relación óptima entre diámetro y altura del separador.

$$\frac{h_{total}}{D} = \frac{h_L + h_f + h_v}{D} = 3 \text{ (óptimo)}$$

Con la herramienta Solver de Excel, se sitúa el cociente de la suma de las tres alturas entre el diámetro como celda objetivo para que el resultado sea 3, variando la celda correspondiente a h_v . En la Tabla V.8, se muestran los resultados obtenidos.

Tabla V.8. Altura del separador gas-líquido S-V.1.

Altura del líquido, h_L (m)	0.515
Espacio libre entre el líquido y la alimentación, h_F (m)	0.457
Altura de la fase vapor (m)	2.846
Altura total del separador (m)	3.350

Por último, se procede a diseñar la malla metálica (mesh demister), que permita una mejor separación de las fases, favoreciendo la coalescencia de gotas de líquido y separándose del vapor al chocar con esta. Típicamente, estas tienen un espesor de 6 pulgadas (15.24 cm) y la caída de presión a través de esta se suele despreciar. (Walas 1988). Esta malla se puede construir de una aleación de acero inoxidable austenítico (SS316L) para asegurar la resistencia a la corrosión y a la acción del hidrógeno que puede debilitar los materiales,

Para el diseño del segundo separador, se sigue el mismo método que el mostrado en el apartado V.3.1.3. En este caso, dado que la cantidad de amoníaco condensado es mayor, se conseguirá una mejor separación de este compuesto. La composición de las corrientes y la constante K para cada compuesto se pueden ver en la Tabla V-B.5. En la Tabla V.9, se pueden ver los resultados obtenidos para este segundo separador.

Tabla V.9. Dimensionado del separador S-V.2.

Velocidad máxima del gas (m/s)	0.284
Área de paso (m^2)	0.724
Diámetro (m)	0.960
Volumen de retención del líquido (m^3)	1.472
Volumen para golpe de líquido (m^3)	1.766
h_F mínimo (m)	0.457
h_L (m)	0.632
h_v (m)	1.671
Altura total (m)	2.76

Si se comparan estos valores con los del primer separador, se puede apreciar como al aumentar considerablemente el flujo molar líquido del separador, el volumen de retención de este y el correspondiente a resistir al golpe son mayores y, con ellos, la altura del líquido en el tanque. En cambio, tanto el diámetro, como la altura total son inferiores en este caso.

V.3.2.4.Purificación del amoníaco y almacenamiento

Como se comentó anteriormente, en España la pureza del amoníaco anhidro necesaria para la fabricación de fertilizantes viene dada en el Real Decreto 506/2013. En este se establece que, como mínimo, debe contener un contenido en nitrógeno del 80% en forma amoniacal. Sin embargo, desde el punto de vista del negocio y de obtener beneficios, es fundamental estudiar el mercado y ver con qué pureza vende la competencia el amoníaco. Verdaderamente, los datos disponibles son escasos, pero en general, empresas como BASF (Alemania) o Agrar (Zaragoza), prometen una pureza superior al 99.6%. («Amoníaco Anhidro 82%» 2025)

Por ello, se decide mezclar las dos corrientes líquidas que salen de los dos tanques flash, en un tanque agitado (Diseño Apéndice-C). La pureza de la segunda corriente es mayor que la primera, por tanto, se mezclan para llevar a cabo la destilación de la corriente resultante. De esta forma, se consigue un buen contacto entre las fases líquida y gas (compuesta por los no condensables) para que se produzca la transferencia de materia, con el fin de extraer por colas amoníaco líquido lo más puro posible.

V.3.2.4.1. . Diseño de la torre de destilación

Se emplea una torre de platos que dispondrá de calderín y condensador. En este caso, en lugar de un condensador total, se usará uno parcial para minimizar las pérdidas de amoníaco por cabezas, pero evitando consumir una cantidad muy elevada de energía en condensar hidrógeno, nitrógeno y argón, que realmente no es necesario licuarlos. Por tanto, estos abandonan la columna por cabezas, pero en estado gas, ya que el condensador, solo va a alcanzar la temperatura necesaria para condensar el amoníaco que llegue a esta etapa. Existe la opción de emplear platos bubble-cap (platos de campana de borboteo), ya que, son muy eficientes para flujos de vapor bajos, como es el caso, dado que la corriente de alimentación fundamentalmente se encuentra en estado líquido. Sin embargo, estos tienden a sufrir fenómenos de corrosión y taponamiento, y, además, tienen un elevado coste. Por consecuencia, se decide utilizar platos de válvula o campana flotante, los cuales disponen de unos agujeros cubiertos por una tapa, que se mueve en función del caudal de vapor y permiten cerrar el orificio. Esto provoca que la eficacia aumente a caudales bajos de vapor, como es el caso.

Para garantizar la máxima eficiencia en la destilación, se recomienda trabajar por debajo de 20 bares. Por tanto, se instala una válvula previa que reduzca la presión de la mezcla líquida que proviene de los separadores (≈ 200 atm) hasta las 21.71 atm (22 bar), antes de impulsarla hacia la torre de destilación que va a trabajar a 20 bar (Wostbrock et al. 2006).

Dado que se trata de una mezcla multicomponente compleja, se realiza la simulación en Aspen HYSYS para estimar la pureza que se puede alcanzar. Para ello, se introducen tres especificaciones para suplir los grados de libertad de la columna: (1) la corriente en fase gas que sale del condensador esté libre de amoniaco; (2) la corriente en fase líquida que sale del condensador esté libre de argón; (3) fracción molar del amoniaco por colas sea del 99.9%, ya que, con esta composición nos colocaríamos por encima de la competencia, atrayendo más a los compradores.

El programa permite conocer el consumo energético requerido por el condensador y el calderín, siendo, respectivamente, de $5.183 \cdot 10^4$ kJ/h y $5.356 \cdot 10^4$ kJ/h, para obtener una temperatura de salida -143.2 °C y 49.73 °C en cada uno de los cambiadores de calor. Tanto el calderín como el condensador serán intercambiadores de calor de carcasa y tubos.

Con estas especificaciones se busca la relación de reflujo mínima, con la Ecuación V.26, (Henley y Seader 2003).

$$N_{min} = \frac{\ln \frac{\left(\frac{x_D}{x_B}\right)_{lk}}{\left(\frac{x_D}{x_B}\right)_{hk}}}{\ln \left(\frac{\alpha_{lk}}{\alpha_{hk}}\right)} \quad [V.26]$$

Donde:

x_D y x_B : composiciones del destilado (D) y colas (B)

α : volatilidad

El subíndice 'hk' se utiliza para el componente clave pesado, es decir, el menos volátil, en este caso el amoniaco, y por el contrario, 'lk' representa al más volátil, el hidrógeno.

Para hallar la volatilidad de un componente se realiza el cociente entre su valor de constante de equilibrio K (extraídas de HYSYS) y la del clave pesado. En la Tabla V.2 se muestran los flujos másicos obtenidos en la simulación para cada componente. Resolviendo la Ecuación V.25, se obtiene que se requieren dos etapas teóricas mínimo. Por otro lado, se calcula el parámetro de Underwood θ , con la Ecuación V.27, utilizando la herramienta Solver de Excel. Para ello se debe cumplir que el siguiente sumatorio tome un valor de 1, variando θ . Por otro lado, con la Ecuación V.28, se puede obtener la relación de reflujo mínimo.

$$\sum_{i=1}^n \frac{q z_i}{\alpha_i - \theta} = 1 \quad [V.27]$$

$$R_{min} = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i x_D}{\alpha_i - \theta} - 1 \quad [V.28]$$

Se resuelven las Ecuaciones V.26, V.27 y V.28, y se obtiene θ con valor de $9.6 \cdot 10^{-2}$, una relación de reflujo mínimo de $9.7 \cdot 10^{-3}$ y 2 etapas teóricas. Desde el punto de vista económico, se recomienda que, la relación de reflujo óptima sea 1.5 veces la mínima (Walas 1988), por tanto, esta es de $1.45 \cdot 10^{-2}$.

Al número de etapas teóricas, hay que añadirle una correspondiente al condensador parcial, por lo tanto, el número teórico total de etapas es 3. Considerando una eficacia de plato del 60%, se obtiene que el número real de etapas es 5 (Walas 1988). Entre platos, la distancia se encuentra entre 0.6 y 0.86 m, para garantizar que se pueda acceder a fácilmente a ellos, en este caso, se va a considerar una distancia de 0.6 m. Además, se considera una caída de presión por plato de 0.75 kPa (0.0075 bar) y para el condensador y el calderín, en torno a 5 kPa, por tanto, se aproxima la caída de presión a lo largo de la columna a 0.2 bar (20 kPa) (Peters et al. 2004)

V.3.2.4.2. Almacenamiento del producto final purificado

La cantidad de amoníaco proviene de las corrientes 69 y 71, y esta última, se considera la principal ya que transporta un mayor flujo y la otra se unirá a esta de manera regulada a través de una válvula que permita detener el flujo cuando sea necesario. Ambas corrientes contienen fundamentalmente amoníaco, sin embargo, se encuentran a distinta temperatura. Por ello, se decide instalar en la tubería un mezclador estático que facilite el transporte de materia y energía y consiga una buena homogenización. Este tipo de mezcladores es adecuado para procesos continuos que manejan un elevado volumen, ya que, no tienen piezas móviles y, por tanto, son menos susceptibles a fallos. Se decide emplear un mezclador helicoidal, ya que, dispone de múltiples elementos de mezcla para garantizar una buena uniformidad.

V.3.2.5. Bucle de recirculación y purga

Debido a la baja conversión alcanzada en el reactor, el caudal de reactivos no reaccionados que son recirculados al mismo es elevado. Dada la presencia de argón, es preciso realizar una purga que evite su acumulación a lo largo del sistema (Cheema y Krewer 2018).

Cuanta mayor es la cantidad de amoníaco recirculada al reactor, menor conversión se va a alcanzar en este, ya que, se ve favorecida la reacción inversa. Por tanto, tras realizar varias iteraciones en conjunto entre la sección IV y V, se decide establecer una cantidad recirculada máxima, que permita alcanzar una conversión adecuada y reducir la cantidad de materia perdida por la purga. Esto se hace realizando múltiples iteraciones observando el efecto de variar la cantidad recirculada sobre la conversión en el reactor. Como se puede ver

en la Tabla V.2, la cantidad de amoníaco recirculada es mucho menor que la de reactivos no reaccionados, de modo que el amoníaco representa el 1.2% de esta corriente. Conocida la cantidad a recircular y la que llega a la bifurcación entre la recirculación y la purga, se puede obtener la relación de recirculación, que tiene un valor de 0.992.

- *Acondicionamiento de la presión en la corriente de recirculación*

La corriente que se recircula debe alcanzar la presión a la que trabaja el reactor pasando a través de un compresor y un cambiador de calor. Empleando las ecuaciones mostradas en la Sección I (I.17 y I.18), se calcula, primero la temperatura que va a alcanzar la corriente de recirculación antes de entrar al reactor al pasar por el compresor. Considerando un factor de expansión de 1.534, extraído de Aspen HYSYS, se obtiene una temperatura a la salida, T_2 , de 238.1 K (-34.89°C).

Conocida esta temperatura, con la ecuación I.18, se obtiene un trabajo de compresión de 1.60 J/mol. Siendo el flujo que atraviesa el compresor de 7 082.309 kmol/h (1967.308 mol/s), la potencia necesaria para realizar la compresión es de 3 147.6 W. Este tipo de compresor tiene una eficiencia del 70%, por tanto, la potencia total es 4 496.6 W (Peters et al. 2004)

La densidad de esta corriente es de 84.10 kg/m³ y el flujo másico 61 583.67 kg/h, por tanto, el flujo volumétrico a comprimir es de 732.27 m³/h. (Aspen HYSYS). En la Figura V-B.1, se muestra el tipo de compresor a elegir en función de la presión de descarga y el flujo volumétrico en pies cúbicos. En este caso, se lee en la gráfica en el eje de abscisas, 25859.9 ft³/h y en ordenadas, la presión de descarga 2 939.2 psia (200 atm). Por tanto, se decide que se va a utilizar un compresor centrífugo.(Brun y Kurz 2018)

El resto de la corriente de cabezas del segundo separador que no se recircula, se purga haciéndolo pasar a través de una válvula para reducir la presión hasta la atmosférica y se expulsa al exterior. Aunque se pierda cierta cantidad de amoníaco en la purga, esta es de vital importancia, ya que, debido al elevado flujo de recirculación puede aumentarse la concentración de compuestos como el argón. Sería recomendable instalar un sistema de lavado de gases con agua, para tratar los gases, sobre todo el amoníaco, antes de salir a la atmósfera.

- *Acondicionamiento de la temperatura en la corriente de recirculación*

Una de las variables fundamentales que debe ser controlada previa entrada al reactor, es la temperatura. El reactor opera a 400 °C, mientras que la corriente de recirculación se encuentra a -34.9 °C. Por consiguiente, se instalan dos cambiadores de calor en serie (C-V.8 y C-V.9).

Se decide aprovechar el calor extraído en el cambiador C-V.1 y C-V.2, con el fin de reducir el consumo energético que, por otro lado, es ya bastante elevado para las necesidades de frío. Por tanto, se disponen de 18566 kW para calentar la corriente de recirculación.

Por otra parte, se calcula la cantidad de calor necesaria para que la mezcla alcance una temperatura de 200 °C. Al igual que anteriormente, se decide dividir este incremento de temperatura en dos cambiadores de calor, con el objetivo de garantizar seguridad durante el proceso y evitar daños en los equipos y materiales. Se recurre nuevamente a la Ecuación I.20 para calcular el calor que debe absorber la corriente en cada uno de los cambiadores y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla V.10. Como puede observarse, el calor extraído en los enfriamientos es más que suficiente para elevar la temperatura de la corriente de recirculación a 200 °C.

Tabla V.10. Calor requerido para acondicionar la corriente de recirculación al reactor.

Equipo	T entrada (°C)	T salida (°C)	Flujo (kg/h)	Cp (kJ/kg°C)	Q (kW)
C-V.8	-34.92	100	61584	3.37	8501.5
C-V.9	100	200	61584	3.34	5966.77

Ambos cambiadores serán de tipo carcasa y tubos, circulando la mezcla recirculada por dentro de los tubos, ya que, se encuentra a elevada presión y puede ocasionar más daños en los equipos. Se estima un valor de U de 50 W/m²K ya que, se está calentando gas a 200 atmósferas (Walas 1988). El área de intercambio de estos cambiadores es de 426.94 m² (C-V.8) y 1 008 m² (C-V.9).

V.4. DISEÑO MECÁNICO

V.4.1. DISEÑO MECÁNICO DEL SEPARADOR GAS-LÍQUIDO S-V.1

V.4.1.1. Código ASME para recipientes a presión

Se va a realizar el diseño mecánico del primer separador gas-líquido (S-V.1) ya que, es donde tiene lugar la primera separación física del amoníaco del resto de componentes de la mezcla. El diseño se realiza en base a la normativa ASME sobre recipientes a presión, que proporciona ecuaciones que relacionan la presión de operación, con el grosor que deben tener las paredes de los equipos, el máximo estrés permitido y otra serie de variables para garantizar la seguridad del proceso.

La presión que debe soportar el equipo, considerando la presión a la salida del reactor y la caída de presión en el condensador C-V.4 es de 20111 kPa, sobre la que se aplica, por motivos de seguridad, un margen adicional del 10%, por si se produjesen sobrepresiones durante la operación (Peters et al. 2004), que hace que la presión de diseño sea de 22125 kPa.

La parte central del equipo se corresponde con un cuerpo cilíndrico de radio 0.56 m (calculado en el apartado V. 3.1.3), y en cuanto a los cabezales, se decide que el superior sea de tipo semiesférico, capaz de soportar elevadas presiones y, el inferior, de tipo cónico para evitar la formación de zonas muertas de líquido y favorecer su salida por la parte baja del tanque. En la Figura V.12, se muestran los parámetros que rigen la geometría del cabezal (CoDesign Engineering 2023).

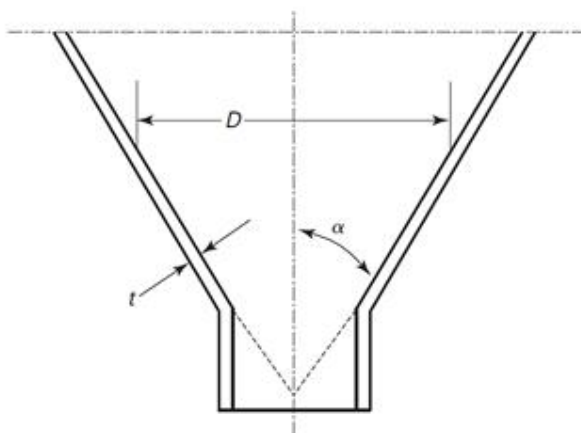


Fig. V.11. Cabezal cónico.

Como material, se va a emplear el mismo que para el cambiador de calor, Inconel 625, ya que va a soportar también una elevada presión. Para este material, la tensión máxima admisible entre los -20°F y los 100°F (la temperatura de trabajo en este equipo es de 20°C, que equivale a 68°F), es de 413685 kPa. (Special Metals Corporation 2013).

Para estimar el grosor de las paredes del recipiente, se supone que las juntas están soldadas a tope por ambos lados y radiografiadas complementemente, por lo que la eficacia de las juntas toma un valor de 1. Además, hay que considerar una cantidad extra para calcular el grosor de las paredes, debida a la posible corrosión, de 9 mm (Walas 1988)

El grosor de la pared de la parte central del separador se calcula mediante la Ecuación I.5, obteniéndose un grosor de 4 cm. Con este valor, se cumplen los requisitos para poder aplicar la ecuación, que se expresan por medio de las siguientes inecuaciones.

$$t \leq \frac{r_i}{2} \Rightarrow 0.04 < 0.28 \text{ m}$$

$$P \leq 0.385 SE_j \Rightarrow 22255.28 < 159268.96 \text{ kPa}$$

El grosor obtenido es un valor bajo, ya que, este material es muy resistente a elevadas presiones, y por consiguiente, la tensión máxima admisible también lo es.

Por otro lado, para determinar el grosor del cabezal inferior de tipo cónico se pueden emplear dos ecuaciones diferentes (Ecuación V.29. y V.30) («Asme BPVC 2021 Section VIII Div. 1» 2021).

$$t = \frac{P D}{2 \cos \alpha (SE_j - 0.6P)} \quad [\text{V.29}]$$

$$t = \frac{P D_o}{2 \cos \alpha (SE_j + 0.4P)} \quad [\text{V.30}]$$

Donde α se corresponde con la mitad el ángulo de semi-ápice, que toma un valor de 30° , es el diámetro mayor externo del cono, es decir, se sumará al diámetro del cuerpo dos veces el valor del grosor de este, tomando como estimación inicial el resultado obtenido con la Ecuación V.23. Según las ecuaciones V.29 y V.30, se obtiene un grosor del cabezal inferior de 3.57 cm y 3.60 cm, respectivamente. Siguiendo un criterio conservador, se da por válido el grosor mayor de los dos obtenidos, por tanto, el grosor final del cabezal para realizar el diseño será de 3.60 cm.

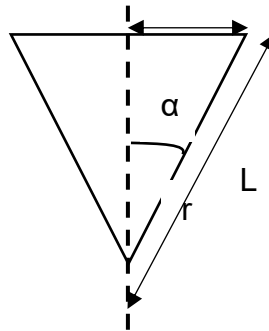
En el diseño del cabezal superior semiesférico se utiliza la Ecuación V.31 en base al código ASME, resultando un valor de 3.93 cm.

$$t = \frac{P r_i}{S E_j - 0.2P} + C_c \quad [\text{V.31}]$$

De todos los valores, el valor más alto es el del cuerpo cilíndrico, por tanto, este será el grosor mínimo en todo el equipo para garantizar que soporta la presión de trabajo y la operación se lleva a cabo de manera segura. («Asme BPVC 2021 Section VIII Div. 1» 2021)

Por último, se calcula el peso del material utilizando la densidad de la aleación elegida: Inconel 625, que tiene un valor de 8440 kg/m^3 («Inconel 625 Composición química y propiedades físicas - Conocimiento» 2025). diferenciando la geometría de cada una de las partes, con la Ecuación V.35, donde El primer término está relacionado con la parte cilíndrica del separador, el segundo con el cabezal superior semiesférico y el último, con el inferior cónico. En este tercero, aparece la generatriz del cono, representada en el siguiente esquema con la letra L, que se calcula a partir de $L = \frac{r}{\sin \alpha}$, tomando un valor de 1.12 m.

$$\text{Peso material} = \rho t [(2\pi rh) + (2\pi r^2) + (\pi rL)] \quad [\text{V.32}]$$



$$L = \frac{r}{\sin \alpha} \quad [\text{V.33}]$$

La generatriz del cono toma un valor de 1.12 m.

Se determina, por tanto, que el peso total del separador fabricado con Inconel 625 es de 6 639 kg. A este valor hay que añadirle un 20% debido a las conexiones, bocas de hombre y soportes, por tanto, el peso final es de 7 304 kg. (Peters et al. 2004).

El separador se va a situar en la planta soportado por postes, de forma que se facilite el acceso a la parte inferior del tanque, donde pueden producirse atascos de líquido o cualquier otra incidencia, así como las tareas generales de mantenimiento. (Sinnott 2005)

V.5. EVALUACIÓN ECONÓMICA

Se procede a calcular los costes de los distintos equipos de la sección V, así como los de los servicios necesarios. Las gráficas y correlaciones necesarias se extraen del libro de Peters y colaboradores (Peters et al. 2004)

V.5.1. EQUIPOS

V.5.1.1. Cambiadores de calor

Para calcular el coste de los intercambiadores de calor se utiliza el área de intercambio de estos. En la Tabla V.11, se muestra el coste para cada equipo. Todos los equipos son cambiadores de calor de carcasa y tubos (Figura II-B.4), excepto el calderín y el condensador de la torre de destilación, que debido a la baja cantidad de material que es necesario calentar, se emplea uno de doble tubo, estos proporcionan una buena transferencia de calor con un área de intercambio pequeño, los costes se pueden estimar por medio de gráficas extraídas de la bibliografía (Peters et al. 2004). Para los condensadores C-V.4 y C-V.5 se considera el factor del material Inconel 625, con valor de 5, ya que, al tener lugar el cambio de fase, se decide aumentar la resistencia del equipo. Para el resto de equipos se va a emplear acero inoxidable 316 L. En todos los cambiadores se tiene en cuenta un multiplicador de 2 debido a la alta presión.

Tabla V.11. Costes cambiadores calor.

Cambiadores	Área	Coste (2002, \$)
C-V.1	566.57	130000
C-V.2	602.49	140000
C-V.3	416.08	96000
C-V.4	425.77	740000
C-V.5	173.40	800000
C-V.6	0.36	1000
C-V.7	0.25	980
C-V.8	426.94	100000
C-V.9	1008.05	200000
TOTAL		2207980

V.5.1.2. Separadores de fases

En el apartado V.4 se calculó el peso del primer equipo, 7 304 kg. El segundo se calcula del mismo modo, empleando la densidad del Inconel 625 y este, tiene un peso de 6 142 kg. Por tanto, el coste en el año 2002 para los separadores S-V.1 y S-V.2 asciende a 47448 \$ y 42723.5 \$, respectivamente.

V.5.1.3. Compresor

Se estimó anteriormente que se requieren 4.5 kW para conseguir mezcla perfecta, lo cual supone, utilizando la Ecuación V.35, lo cual supone un coste de 16043 \$ (2002) (Sinnott 2005).

V.5.1.4. Tanque de mezcla con agitación

Las dimensiones del tanque son 0.95 m de diámetro y una altura de 2.84 m.

Por otro lado, el agitador de hélice debe girar a una cierta potencia para conseguir una mezcla homogénea. Para calcular la potencia de agitación se emplea la Ecuación V.34.

$$P = K_T n^3 d^5 \rho \quad [V.34]$$

Donde:

K_T : una constante característica para un agitado de hélice de tres palas y paso cuadrado, que toma un valor de 0.32.

d : diámetro del agitador. En este caso se considera una relación del tamaño de este diámetro con el del tanque de 0.25, por tanto, tiene un valor de 0.24 m.

ρ : densidad del fluido (kg/m^3)

n : velocidad de agitación, se considera de 1000 rpm para conseguir buena mezcla (Walas 1988) (s^{-1})

La potencia de agitación resulta de 813.96 W y mediante la Ecuación V.35, se calcula el coste relativo a esta potencia, considerando un multiplicador de 1.25 por estar el tanque cerrado. El resultado son 2250 \$ para el agitador.

$$\text{Coste (\$)} = a + bS^n \quad [V.35]$$

'a', 'b' y 'n' son parámetros establecidos para los diferentes tipos de equipo que existen.

Por otro lado, con la Figura 12-52 se calcula el coste del tanque a partir de su volumen y considerando un 20 % adicional por estar en posición vertical, por tanto, su coste es de 10700 \$ (Peters et al. 2004)

V.5.1.5. Torre de destilación

La torre tiene una altura de 6 m y un diámetro de 1.26 m, por tanto, se utiliza la Figura (Figure 15-11), para calcular el coste de la columna vertical, sin incluir platos ni conexiones. Interpolando la isolínea del diámetro para su altura, se obtienen unos costes de adquisición de 162 000 €. Con la Figura 15-13, se calcula el precio de cada plato de válvula, que resulta de 4 500 €, por tanto, para los 5 platos, el coste adquisición total de la columna y los platos es de 166 500 € (Peters et al. 2004)

V.5.1.6. Mezclador estático

Para calcular el coste del mezclador estático, se considera que su diámetro es idéntico a la tubería en el que se coloca, por tanto, 0.074 m. Este tiene unos costes de 782 € (Figura 12-41). Como material se opta por acero inoxidable, por tanto, hay que considerar un factor de corrección de 3, por tanto, los costes de adquisición son 2 346 € (Peters et al. 2004)

V.5.1.7. Válvulas reguladoras de presión

A partir del diámetro de la tubería en la que estas se encuentran, se calcula el coste de cada válvula con la Figura 12-10 (Peters et al. 2004). En la Tabla V.12 se muestran estos costes.

Tabla V. 12. Coste válvulas.

Válvulas	Diámetro	Coste (2002, \$)
VLV-V.1	0.02	1000
VLV-V.2	0.07	1050
VLV-V.3	0.01	900
VLV-V.4	0.07	1050

V.5.2. UTILITIES

Se calculan también los costes asociados a aquellos servicios necesarios para llevar a cabo el proceso, como electricidad y fluidos térmicos.

Utility	Consumo	Precio	Coste (€, 2025)
Therminol 68	8.87 m ³ /año	42.5 \$/m ³	377
Agua de red	14385 kg/año	1.92 €/m ³ (España)	3993
Agua + propilenglicol (60%)	5.80 m ³ /año	10 777 €/m ³	62472
Electricidad	42087 (kWh/año)	0.064 \$/kWh	2676

Para calcular la electricidad, se tiene en cuenta el consumo del compresor y el del agitador.

Respecto al precio del Therminol 68, en una página web aparece el precio de este en reales brasileños, BRL (Brasil). Equilvadría a unos 4 euros por litro de Therminol, por tanto, tomando una densidad media a 200 °C de 800 kg/m³, se requieren 507 m³/h.. («Precios de Fluidos para transferencia de calor Therminol» 2025)

A la hora de calcular el coste de los fluidos térmicos, se tiene en cuenta que el fluido se recircula continuamente para continuar con la operación y reducir costes. Para ello, se toma como base que el refrigerante (o calefactor), circula dentro de un sistema cerrado. Se estima que este sistema una vez lleno, es capaz de satisfacer las necesidades térmicas durante 15 minutos. Se asume que existe un 7% de pérdidas durante la operación, como posibles fugas.

V.6. BIBLIOGRAFÍA

Amoniaco Anhidro 82%. *Agrar Fertilizantes* [en línea], 2025. [consulta: 26 mayo 2025]. Disponible en: <https://agrarfertilizantes.es/amoniaco-anhidro-82/>.

Asme BPVC 2021 Section VIII Div. 1. *xdocs.net* [en línea], 2021. [consulta: 15 junio 2025]. Disponible en: <https://xdocs.net/>.

Aspen HYSYS, 2019. 2019. S.I.: s.n.

BRANAN, C., 2005. *Rules of thumb for chemical engineers: a manual of quick, accurate solutions to everyday process engineering problems*. 4th ed. Amsterdam Boston: Elsevier. ISBN 978-0-7506-7856-8. 660

BROGAN, R.J., 2011. SHELL AND TUBE HEAT EXCHANGERS. *Thermopedia* [en línea]. S.I.: Begel House Inc., [consulta: 18 junio 2025]. ISBN 978-1-56700-456-4. Disponible en: <https://www.thermopedia.com/content/1121/>.

BRUN, K. y KURZ, R., 2018. *Compression Machinery for Oil and Gas*. S.I.: Gulf Professional Publishing. ISBN 978-0-12-814684-2.

BYRNE, R.C., 2025. STANDARDS OF THE TUBULAR EXCHANGER MANUFACTURERS ASSOCIATION. ,

CENGEL, Y., 2018. *Transferencia De Calor Y Masa* [en línea]. 3ª Edición. S.I.: s.n. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/TransferenciaDeCalorYMasaYunusCengelTerceraEdicion>.

CHEEMA, I.I. y KREWER, U., 2018. Operating envelope of Haber–Bosch process design for power-to-ammonia. *RSC Advances*, vol. 8, no. 61, pp. 34926-34936. ISSN 2046-2069. DOI 10.1039/C8RA06821F.

CODESIGN ENGINEERING, 2023. ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Division 1 and Division 2. . S.I.: s.n.,

COLBURN, A.P. y HOUGEN, O.A., 1934. Design of Cooler Condensers for Mixtures of Vapors with Noncondensing Gases. *Industrial & Engineering Chemistry*, vol. 26, no. 11, pp. 1178-1182. ISSN 0019-7866. DOI 10.1021/ie50299a011.

EGUSQUIZA, S., 2011. EQUIPOS INDUSTRIALES Y MANTENIMIENTO: INTERCAMBIADOR DE CALOR. *EQUIPOS INDUSTRIALES Y MANTENIMIENTO* [en línea]. [consulta: 18 junio 2025]. Disponible en: <https://urpingindusteqymaq.blogspot.com/2011/05/intercambiador-de-calor.html>.

Fundamentals Of Heat And Mass Transfer Frank P Incropera [en línea], [sin fecha]. S.I.: s.n. [consulta: 4 mayo 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/FundamentalsOfHeatAndMassTransferFrankPIncropera>.

HAAR, L. y GALLAGHER, J.S., 1978. Thermodynamic properties of ammonia. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 7, no. 3, pp. 635-792. ISSN 0047-2689, 1529-7845. DOI 10.1063/1.555579.

HENLEY, E.J. y SEADER, J.D., 2003. *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. México: Reverté. ISBN 978-968-6708-28-8.

INAMUDDIN, BODDULA, R. y ASIRI, A.M., 2020. *Sustainable Ammonia Production* [en línea]. Cham: Springer International Publishing. [consulta: 19 mayo 2025]. Green Energy and Technology, ISBN 978-3-030-35105-2. Disponible en: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-030-35106-9>.

Inconel 625 Composición química y propiedades físicas - Conocimiento. [en línea], [sin fecha]. [consulta: 4 julio 2025]. Disponible en: <https://www.ssmsteels.com/info/inconel-625-chemical-composition-and-physical-17350975915549696.html>.

INCROPERA, F.P., 2013. *Foundations of heat transfer: Frank P. Incropera ... [et al.]* [en línea]. Singapore: John Wiley. [consulta: 29 mayo 2025]. ISBN 978-1-118-65358-6. Disponible en: <https://research.ebsco.com/linkprocessor/plink?id=4b02d4e8-ab66-30b0-8506-ee8e6a427b57>.

Perry S Chemical Engineers Handbook Mc Graw Hill 8th Ed 2008 [en línea], [sin fecha]. S.l.: s.n. [consulta: 4 julio 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/perryschemicalengineershandbookmcgrawhill8thed2008>.

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D., WEST, R.E. y WEST, R.E., 2004. *Plant design and economics for chemical engineers*. 5. ed, international ed. 2004. Boston: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1.

Precios de Fluidos para transferencia de calor Therminol. *e-Industria* [en línea], [sin fecha]. Disponible en: <https://www.quiminet.com/productos/fluidos-para-transferencia-de-calor-therminol-7383587115/precios.htm>.

Shell-and-tube heat exchangers Standard series and customer oriented solutions, [sin fecha]. S.l.: s.n.

SINNOTT, R., 2005. *Chemical Engineering Design: Chemical Engineering Volume 6*. 4th ed. Jordan Hill: Elsevier Science & Technology. Chemical Engineering Ser, ISBN 978-0-7506-6538-4.

SINNOTT, R.K. y TOWLER, G.P., 2019. *Diseño en ingeniería química*. Barcelona: Editorial Reverté. ISBN 978-84-291-9504-0.

Slug Catcher Multiphase CFD Modeling: Optimization and Comparison with Industrial Standards. *Journal of Applied Fluid Mechanics* [en línea], 2016. vol. 9, no. SI1, [consulta: 14 junio 2025]. ISSN 17353572, 17353645. DOI 10.36884/jafm.9.SI1.25816. Disponible en: https://www.jafmonline.net/article_1951_c33eb5729e7b64ff3da7008b2fbd224a.pdf.

SPECIAL METALS CORPORATION, 2013. Inconel Alloy 625. ,

TEMPCO, 2011. *Typical Heat Transfer Coefficients*. 2011. S.I.: s.n.

Therminol 68 Heat Transfer Fluid. , [sin fecha].

WALAS, S.M., 1988. *Chemical Process Equipment*. S.I.: s.n.

WANKAT, P.C. y GONZÁLEZ Y POZO, V., 2008. *Ingeniería de procesos de separación*. 2a ed. México: Pearson Educación. ISBN 978-970-26-1281-0.

WOSTBROCK ET AL., [sin fecha]. United States Patent (2006).

APÉNDICE V-A: LISTA DE SÍMBOLOS

V-A.1. SÍMBOLOS LATINOS

A	Área de intercambio de calor
A_c	Área de paso del vapor en el separador
A_i, A_o	Área interna/externa de tubos en un cambiador de calor
a_s	Área de la carcasa de un cambiador de calor
B	Espacio mínimo entre deflectores
C	Distancia entre superficie de tubos
C_p	Capacidad calorífica
D	Diámetro
D_h	Diámetro hidráulico
F	Factor de corrección en flujo contracorriente
f	Factor de fricción de Fanning
G_s	Densidad de flujo másico
h	Coefficiente de transferencia de calor por convección
K_i	Constante equilibrio líquido-vapor
k	Conductividad térmica
K_T	Coefficiente del agitador
$\dot{m}$	Flujo másico
M_w	Peso molecular del vapor
N	Número de tubos
N_{min}	Número mínimo de etapas teóricas
n	Velocidad de agitación
Nu	Número de Nusselt
P	Potencia
Q	Calor transferido
q	Condición de alimentación
R	Relación de reflujo

R_f	Factor de ensuciamiento
T	Temperatura
U	Coefficiente global de transmisión de calor
u	Velocidad máxima del gas
v_t	Velocidad en los tubos del cambiador de calor
x	Fracción molar del líquido
y	Fracción molar del vapor
z	Fracción molar de la alimentación

V-A.2. SÍMBOLOS GRIEGOS

α	Volatilidad
γ	Factor de expansión
ΔP	Caída de presión
ΔT	Diferencia de temperaturas
ΔT_{ml}	Diferencia de temperaturas media logarítmica
μ	Viscosidad
ρ	Densidad
ψ	Fracción vaporizada

APÉNDICE V-B: TABLAS Y GRÁFICAS

Tabla V-B. I. Simulación de la fracción líquida y vapor del amoniaco en función de la temperatura en el separador S-V.1. (Simulado en ASPEN HYSYS)

T (°C)	NH ₃ cabezas (kmol/h)	NH ₃ colas (kmol/h)
0	340.82	508.49
2	364.97	484.33
4	390.58	458.73
6	417.70	431.61
8	446.42	402.89
10	476.82	372.49
12	509.01	340.30
14	543.07	306.24
16	579.11	270.20
18	617.24	232.07
20	657.58	191.73
22	700.25	149.06
24	745.39	103.92
26	793.14	56.16
28	843.67	5.64
30	849.31	0
32	849.31	0

** Se desprecian los últimos valores de la tabla ya que se mantienen constantes.

Tabla V-B. II. Flujo molar de amoniaco en las corrientes de salida del separador S-V.2.

T (°C)	NH ₃ cabezas (kmol/h)	NH ₃ colas (kmol/h)
-50	44.74	590.018
-45	56.58	577.768
-40	70.89	563.104
-35	88.05	545.628
-30	108.47	524.902
-25	132.64	500.444
-20	161.06	471.724
-15	194.33	438.155
-10	233.09	399.080
-5	278.09	353.764
0	330.14	301.379
5	390.20	240.981
10	459.36	171.487
15	538.88	91.647
20	630.24	0
25	630.01	0
30	629.82	0

Tabla V-B. III. Producto UA y consumo energético del C-V.4 en función de la temperatura.

T (°C)	UA	Consumo (kJ/h)
-20	$1.96 \cdot 10^{13}$	$4.41 \cdot 10^7$
-15	$2.67 \cdot 10^{11}$	$4.20 \cdot 10^7$
-10	$7.70 \cdot 10^{10}$	$3.99 \cdot 10^7$
-5	$3.13 \cdot 10^{10}$	$3.76 \cdot 10^7$
0	$1.37 \cdot 10^{10}$	$3.52 \cdot 10^7$
5	$5.31 \cdot 10^9$	$3.27 \cdot 10^7$
10	$7.13 \cdot 10^6$	$3.01 \cdot 10^7$
15	$1.34 \cdot 10^6$	$2.73 \cdot 10^7$
20	$9.01 \cdot 10^5$	$2.44 \cdot 10^7$
25	$6.46 \cdot 10^5$	$2.13 \cdot 10^7$
30	$4.91 \cdot 10^5$	$1.87 \cdot 10^7$
35	$4.09 \cdot 10^5$	$1.74 \cdot 10^7$
40	$3.44 \cdot 10^5$	$1.60 \cdot 10^7$
45	$2.90 \cdot 10^5$	$1.47 \cdot 10^7$
50	$2.44 \cdot 10^5$	$1.33 \cdot 10^7$
55	$2.06 \cdot 10^5$	$1.20 \cdot 10^7$
60	$1.72 \cdot 10^5$	$1.06 \cdot 10^7$
65	$1.42 \cdot 10^5$	$9.30 \cdot 10^6$
70	$1.15 \cdot 10^5$	$7.96 \cdot 10^6$
75	$9.11 \cdot 10^4$	$6.63 \cdot 10^6$
80	$6.95 \cdot 10^4$	$5.30 \cdot 10^6$
85	$4.99 \cdot 10^4$	$3.98 \cdot 10^6$
90	$3.19 \cdot 10^4$	$2.65 \cdot 10^6$
95	$1.53 \cdot 10^4$	$1.33 \cdot 10^6$
100	$8.38 \cdot 10^1$	$7.54 \cdot 10^3$

Tabla V-B. IV. Cálculo iterativo para el cambiador C-V.4.

U supuesto (W/m ² K)	80.00	223.02	244.60	250.88	252.58	253.04	253.16	253.19	253.20	253.20	80.00	223.02
A (m ²)	1347.56	483.39	440.74	429.71	426.81	426.05	425.84	425.79	425.78	425.77	1347.56	483.39
N	4617	1656	1510	1472	1462	1460	1459	1459	1459	1459	4617	1656
at (m ²)	0.80	0.29	0.26	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.80	0.29
Flujo volumétrico (m ³ /h)	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35
v (m/s)	0.04	0.11	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.04	0.11
Re	626.26	1745.84	1914.79	1963.93	1977.27	1980.82	1981.76	1982.01	1982.08	1982.10	626.26	1745.84
Pr	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14	6.14
F	0.08	0.06	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06
Un	9.78	20.81	22.32	22.76	22.88	22.91	22.92	22.92	22.92	22.92	9.78	20.81
Hi	400.26	851.74	913.71	931.53	936.35	937.63	937.97	938.06	938.09	938.09	400.26	851.74
U calculado (W/m ² K)	223.02	244.60	250.88	252.58	253.04	253.16	253.19	253.20	253.20	253.20	223.02	244.60
$ U_{calculado} - U_{supuesto} $	143.02	21.58	6.28	1.70	0.45	0.12	0.03	0.01	0.00	0.00	143.02	21.58

Tabla V-B. V. Valores de K y composición de las corrientes del separador S-V.1 y S-V.2.

Separador S-V.1					Separador S-V.2				
K	z	x	y	Componente	K	z	x	Y	
35.26	0.6539	0.0191	0.6752	H ₂	115.4	0.6714	0.0064	0.7374	
49.99	0.2216	0.0046	0.2288	N ₂	221.8	0.2275	0.0011	0.2500	
0.09784	0.1240	0.9761	0.0955	NH ₃	0.01216	0.1005	0.9923	0.0121	
3.965	0.0005	0.0001	0.0005	Ar	3.913	0.0005	0.0001	0.0005	
7.826	5.73·10 ⁻⁹	7.53·10 ⁻¹⁰	5.89·10 ⁻⁹	O ₂	11.28	5.86·10 ⁻⁹	5.66·10 ⁻¹⁰	6.38·10 ⁻⁹	

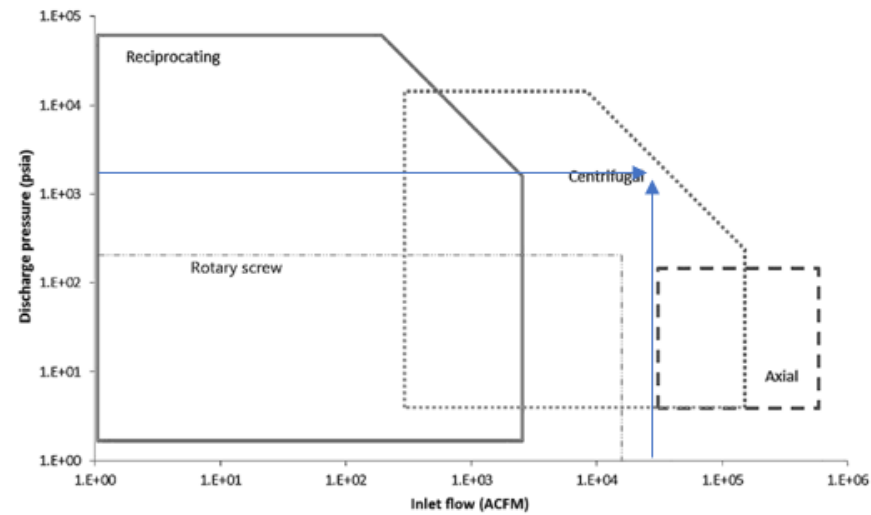


Fig. V-B. 1. Selección del compresor de la recirculación.

Tabla V-B. VI. Cuadro resumen cambiadores de calor de la sección V.

Equipo	Mezcla				Refrigerante				Cambiador				
	T in (°C)	T out (°C)	Flujo (kg/h)	Cp (kJ/kg °C)	T in (°C)	T out (°C)	Cp (kJ/kg h)	Flujo (kg/h)	Q (kJ/h)	Q (kW)	U (W/m²K)	AT _{ml} (°C)	A (m²)
C-V.1	417	280	77177	3.40	160	240	2.22	202118.13	35896180.36	9971.16	120.00	146.66	566.57
C-V.2	280	160	77177	3.34	60	140	1.9	203564.49	30941802.84	8594.95	120.00	118.88	602.49
C-V.3	160	80	77177	3.34	15	35	4.18	246597.13	20615520.24	5726.53	150.00	91.75	416.08
C-V.4	80	25	77177	3.34	15	35	4.18	108027.27	9031079.57	2508.63	253.20	23.27	425.77
C-V.5	25	-35	73594	3.50	-45	10	0.81	86932.88	3848953.06	1069.15	500.00	12.33	173.40
C-V.6	-12.9	-142.8	0.00	4.57	-	-	-	-	-	32.89	700.00	-	0.36
Equipo	Mezcla				Fluido calefactor				Cambiador				
	T in (°C)	T out (°C)	Flujo (kg/h)	Cp (kJ/kg °C)	T in (°C)	T out (°C)	Cp (kJ/kg h)	Flujo (kg/h)	Q (kJ/h)	Q (kW)	U (W/m²K)	AT _{ml} (°C)	A (m²)
C-V.7	-12.9	49.7	14652.784	5.532	140	60	1.9	135.6578947	5074305.831	20.62	1000	81.29	0.25366
C-V.8	-34.9	100	61583.671	3.684	240	160	1.9	201350.89	30605335.43	8501.48	120.00	165.94	426.94
C-V.9	100	200	61583.671	3.488	240	160	2.22	120948.11	21480384.39	5966.77	120.00	49.33	1008.05

APÉNDICE V-C: OTROS CÁLCULOS

V-C.1. DISEÑO DEL TANQUE AGITADO

El punto de mezcla de estas dos corrientes se lleva a cabo en un tanque agitado, para conseguir una buena homogenización de las dos corrientes y poder conducir el flujo deseado hacia la torre de destilación. Incluso, podría instalarse una válvula de bola de tres vías, que permitiera utilizar directamente el producto, sin pasar por la destilación y el tanque de almacenamiento. Se va a emplear un agitador de tipo hélice marina, como el mostrado en la Figura V-B.8, ya que, son adecuados para fluidos de baja viscosidad y permiten conseguir una buena mezcla rápidamente.



Fig. V-B. 2. Agitador de tipo hélice.

El tanque debe tener la capacidad de contener 14708 kg/h o 22.7 m³/h. En la literatura se encuentran valores de tiempos de mezcla óptimos para reactores de tanque agitado entre 5 y 10 minutos (Branan 2005). En este caso, dado que en el tanque no tiene lugar ninguna reacción química y, además, la composición de ambas corrientes es similar, se va a considerar un tiempo de mezcla de 5 minutos. Por tanto, el tanque debe tener una capacidad de 1.9 m³ o de 2 m² considerando un factor de seguridad del 10%. Al igual que para el separador, se considera que la relación óptima entre altura y diámetro es 3, por tanto, el tanque de mezcla va a tener un diámetro de 0.95 m y una altura de 2.84 m.

V-C.2. DIMENSIONADO DE LA TORRE DE DESTILACIÓN T-V.1

Para el dimensionado de la columna, es fundamental calcular la velocidad del vapor que no debe superar aquel valor que pudiera causar un arrastre excesivo de líquido. Para calcular esta velocidad máxima admisible del vapor se utiliza la siguiente expresión, que proviene de la de Souders y Brown (Sinnott 2005)

$$u_v = (-0.171 l_t^2 + 0.27 l_t - 0.047) \left[\frac{\rho_L - \rho_v}{\rho_v} \right]^{\frac{1}{2}} \quad [\text{V-B.1}]$$

Siendo:

u_v : máxima velocidad admisible del vapor (m/s)

l_t : espaciado entre platos (m). Puede tomar valores entre 0.5 y 1.5.

Considerando un espaciado entre platos de 0.6 m, se calcula u_v , resultando un valor de 0.54 m/s. (Sinnott 2005) Este valor permite hallar el diámetro de la columna con la siguiente ecuación:

$$D_c = \sqrt{\frac{4 \hat{V}_w}{\pi \rho_v u_v}} \quad [\text{V-B.2}]$$

Donde $\hat{V}_w$ es el flujo de vapor en kg/s, que, en este caso, es de 4.09 kg/s. Por tanto, se obtiene un diámetro de columna de 1.26 m. Para estimar la altura de la columna, se tienen en cuenta la distancia entre platos y el espacio que debe haber libre tanto en la parte superior como inferior de la columna, para mejorar la separación y evitar acumulación de las sustancias. Como ya se mencionó en la Sección II, se recomienda añadir en torno a 1.2 m en la parte superior de la columna y, 1.8 m en colas, por tanto, la altura total de la columna es 6 m.

6. TUBERÍAS E INSTRUMENTACIÓN

La red de tuberías permite el transporte de las materias primas, compuestos intermedios y productos a lo largo de las distintas etapas y equipos de la planta, por lo que resulta imprescindible para su correcto funcionamiento. No obstante, debido a las limitaciones de espacio, este capítulo no aborda un análisis exhaustivo de la red de tuberías, limitándose al cálculo del diámetro interno de algunos de los tramos de tubería, de las secciones I, III y V. El cálculo de tuberías de la Sección II ha sido realizado en dicha sección, ya que presenta algunas particularidades. Por otro lado, en la sección IV no se ha hecho cálculo de tuberías, sino que se ha diseñado de forma simplificada un diagrama de instrumentación para el reactor, ya que es el equipo principal de la planta y el que precisa de un control instrumental más exhaustivo.

6.1. DIAGRAMA DE INSTRUMENTACIÓN (SECCIÓN IV)

El sistema de control del reactor debe procurar que las condiciones del reactor se mantengan lo más estables posibles. Tal y como se explicó en la sección IV, la reacción es altamente dependiente de la temperatura y la temperatura del lecho va a ir aumentando con su longitud, ya que la reacción de síntesis de amoníaco es exotérmica y el lecho trabaja de manera adiabática; sin embargo, no es recomendable que la temperatura de reacción suba o baje mucho, por lo que es necesario controlarla.

En términos generales, el control de temperatura se consigue controlando del flujo de refrigerante. Sin embargo, cabe mencionar que, en este caso concreto, al tratarse de un reactor en fase gas cuyo volumen es fijo, las variaciones de temperatura también afectarán a las variaciones de presión en el reactor, y en última instancia a la conversión. Evidentemente, la presión debe mantenerse constante por motivos de seguridad, y para que la reacción ocurra de acuerdo con lo esperado. Por tanto, desde el punto de vista del control este se trata de un sistema MIMO (multiple inputs, multiple outputs).

Otra manera de controlar la presión, y por tanto la conversión, es mediante la modificación de los flujos de entrada y salida al reactor, pero esto puede tener efectos más difícilmente predecibles sin un estudio profundo del sistema de reacción. Por tanto, en el sistema de instrumentación diseñado, que se muestra en la Figura 13, se van a considerar únicamente algunos de los aspectos fundamentales para el control.

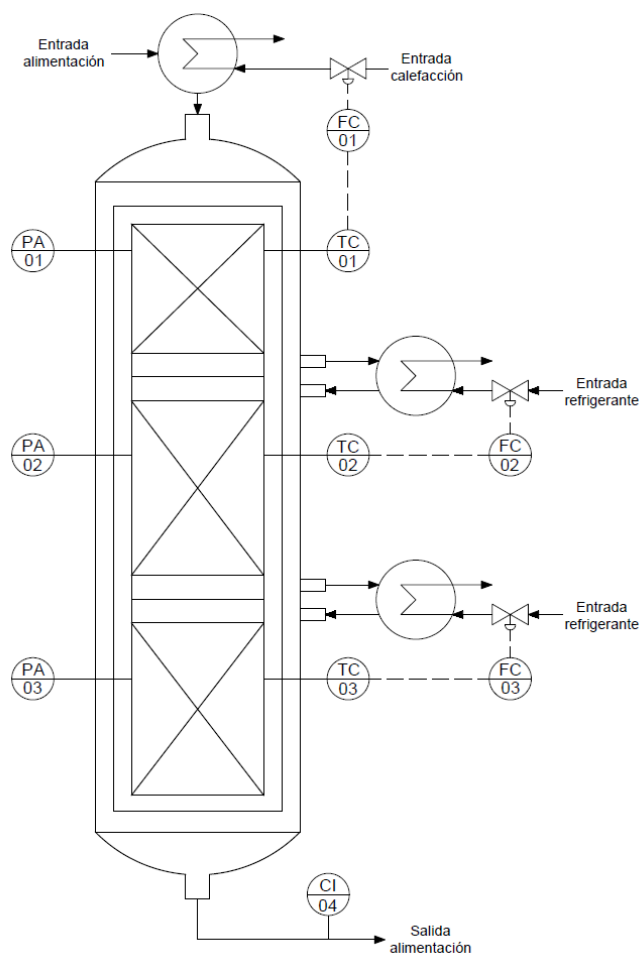


Fig. 13. Diagrama de instrumentación del reactor de síntesis.

El bucle de control 01 corresponde al control de las condiciones del primer lecho de reacción; la temperatura del lecho 1 se realiza con un medidor de temperatura, conectado a una válvula de control del flujo de calefacción de la entrada de alimentación al reactor. Si la temperatura del lecho disminuye, el flujo de fluido refrigerante debe aumentar. Además, por cuestiones de seguridad, el lecho debe tener incorporado una alarma de presión conectada a algún sistema automático de alivio de presión (ver HAZOP, desarrollado en el capítulo 8).

El control de los dos siguientes lechos (bucle 02 y 03) es muy similar, a excepción de que el servicio utilizado es de refrigeración en vez de calefacción. Por tanto, si la temperatura del lecho aumenta, el sistema de refrigeración de proporcionar más flujo y viceversa. El sistema de control de presión es idéntico al del primer lecho.

En cuanto al indicador de composición, que formaría parte de un cuarto bucle de control, tiene como función monitorizar la composición de amoníaco en la corriente de salida, y hacer los cambios pertinentes en el resto de los bucles de control en caso de que la composición de salida no sea conforme a la esperada.

6.2. CÁLCULO DE LAS PÉRDIDAS POR FRICCIÓN EN LOS DISTINTOS TRAMOS DE TUBERÍA (SECCIONES I, III Y IV)

6.2.1. Introducción

El cálculo de las dimensiones exactas de la planta, así como de la longitud de los tramos de cada una de las tuberías se escapan del alcance del trabajo, ya que no se ha elaborado un *layout* preciso de la misma.

A la hora de calcular las pérdidas por fricción de cada uno de los tramos por unidad de longitud se aplica la Ecuación 1, partiendo de que no haya una gran diferencia de altura.

$$h_L = \frac{2f_F L u^2}{gD} \quad [1]$$

Donde:

h_L : pérdida de carga por fricción (m)

f_F : factor de fricción de Fanning

L : Longitud (m)

u : Velocidad (m/s)

g : Aceleración de la gravedad (m/s²)

D : Diámetro de tubería (m)

El factor de fricción de Fanning se calcula de acuerdo con la Ecuación 2

$$\frac{1}{\sqrt{f_F}} = -4 \log \left(\frac{1}{1,37} \frac{\varepsilon}{d} + \left(\frac{6,81}{Re} \right)^{0,9} \right) \quad [2]$$

Donde $\frac{\varepsilon}{d}$ es la rugosidad relativa de la tubería y Re el número adimensional de Reynolds (Ecuación 3)

$$Re = \frac{Du\rho}{\mu} \quad [3]$$

Donde ρ es la densidad y μ la viscosidad del fluido.

Cabe mencionar que estas ecuaciones son aplicables únicamente si el fluido es incompresible. En el caso de los gases, estos se pueden considerar como fluidos incompresibles si la variación de densidad es pequeña ($\rho_1/\rho_2 < 2$) y si la velocidad del fluido es baja (Número de Mach, $Ma < 0.3$) (O. Levenspiel 1996). La velocidad máxima recomendada

para el flujo de aire en tuberías debe ser de 9 m/s, siendo entre 6 y 7 m/s la velocidad más recomendada, ya que velocidades mayores pueden dificultar el control de flujo, generar turbulencia y hacer que las pérdidas de carga aumenten en exceso. A dichas velocidades, el número de Mach del aire circulante es muy inferior a 0.3, así que es posible aplicar las ecuaciones anteriormente indicadas (Atlas Copco).

El número de Mach se calculará con la ecuación 4.

$$Ma = \frac{G}{P} \left(\frac{RT}{(pm)k} \right)^{1/2} \quad [4]$$

Donde:

Ma : Número de mach

G : Velocidad másica del fluido circulante ($\text{kg/m}^2 \text{ s}$)

P : Presión del fluido (Pa)

R : Constante de los gases ideales (J/mol K)

T : Temperatura (K)

pm : Peso molecular (kg/mol)

k : Factor de expansión

La velocidad másica del fluido circulante se calcula dividiendo el flujo máximo por el área transversal de la conducción. Suponiendo una conducción cilíndrica se puede aplicar la Ecuación 5, siendo $\dot{m}$ el flujo másico en kg/s .

$$G = \frac{4\dot{m}}{\pi D^2} \quad [5]$$

Una vez determinado el diámetro mínimo, será necesario seleccionar uno de los diámetros normalizados que se pueden ver en las figuras B.1 y B.2 del Apéndice B.

En los tramos donde la corriente es líquida se procede a realizar un balance de energía mecánica a cada uno de ellos, considerando las pérdidas por fricción y el aporte de energía exterior, si fuera necesario.

A continuación, se muestra dicho balance mediante la Ecuación de Bernoulli 6:

$$\left[\frac{0.5 u^2}{g} + h + \frac{P}{\rho g} \right]_1 + H_B = \left[\frac{0.5 u^2}{g} + h + \frac{P}{\rho g} \right]_2 + h_L \quad [6]$$

Donde h es altura del fluido en cada extremo del tramo (en m), H_B la carga de la bomba (en m) y h_L la pérdida de carga por fricción (en m); el resto de los términos ya han sido definidos.

En la realización de los cálculos se ha considerado que la velocidad del fluido y las alturas de descarga permanecen constantes en cada tramo, de forma que la Ecuación 7 queda reducida a la siguiente:

$$\left[\frac{P}{\rho g} \right]_1 + H_B = \left[\frac{P}{\rho g} \right]_2 + h_L \quad [7]$$

La longitud de cada tramo supuesta es 10 metro de longitud y corresponde a una o varias corrientes del diagrama de flujo (Figura 11) desde la entrada de un equipo hasta la entrada del equipo posterior. Para calcular el diámetro mínimo de tubería se ha empleado la Ecuación 8 :

$$D = Q^{0.448} \rho^{0.132} \mu^{0.025} M \quad [8]$$

$$M = \frac{[1.63 \cdot 10^{-6} K (1 + J) H_y]^{0.158}}{[(1 + F) X E K_F]^{0.158}} \quad [9]$$

Donde Q es el caudal volumétrico de fluido (m^3/s) y M un término cuyo valor, 0.3577, se ha calculado mediante la Ecuación 9 y los términos de Tabla B.III del apéndice, proporcionados por la misma fuente. El resto de los términos ya han sido definidos.

De nuevo, a partir del diámetro mínimo, será necesario seleccionar uno de los diámetros normalizados que se pueden ver en las figuras B.1 y B.2 del apéndice. Posteriormente se calcula la sección de la tubería y la velocidad del fluido, para comprobar que el régimen del flujo sea turbulento ($\text{Re} > 2100$) ya que la Ecuación 8 no es válida para regímenes laminares e intermedios.

6.2.2. Pérdidas de fricción de cada sección

6.2.2.1. Sección I

Para la determinación del diámetro normalizado de tubería más adecuado se han seguido los siguientes pasos:

1. Se busca el diámetro óptimo, fijando una velocidad del aire de 6 m/s. Para ello se hace uso de la herramienta *Solver* de Excel.
2. A continuación, se busca el diámetro normalizado más cercano al diámetro óptimo calculado.

3. Se calculan el resto de los valores y se comprueba que las pérdidas de fricción son adecuadas. Para ello se toman como base 10 m de tubería.

En el Apéndice B (tablas B.I y B.II) se muestra la tabla de datos completa para el cálculo de los diámetros normalizados en cada uno de los tramos. Por otro lado, en las tablas XVI a XVII se muestra un resumen de los mismos.

Tabla XVI. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección I. Parte 1.

	1 a 3	3.1	4	5	6	7
Flujo másico (kg/s)	5.4	5.4	5.4	5.3	4.7	0.5
Diámetro mínimo (m)	0.967	0.526	0.413	0.409	0.408	0.129
Diámetro normalizado (m)	1.047	0.547	0.447	0.447	0.447	0.136
Velocidad (m/s)	5	6	5	6	5	5
Número de Match	0.015	0.013	0.015	0.018	0.015	0.016
Factor de fricción (Fanning)	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$
Pérdida de carga (m/10 m)	0.7	1.6	1.7	2.6	1.6	6.2

Tabla XVII. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección I. Parte 2.

	7.1 y 7.2	8	8.1	8.2	8.3	9
Flujo másico (kg/s)	0.5	4.7	4.7	4.7	4.7	4.7
Diámetro mínimo (m)	0.384	0.386	0.271	0.235	0.165	0.143
Diámetro normalizado (m)	0.397	0.397	0.279	0.227	0.163	0.136
Velocidad (m/s)	6	6	6	6	6	7
Número de Match	0.013	0.017	0.014	0.019	0.016	0.019
Factor de fricción (Fanning)	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$
Pérdida de carga (m/10 m)	2.3	2.4	3.3	5.3	6.7	9.4

Cabe mencionar que la corriente 2 precede a un equipo de filtración que consta de tres filtros en paralelo. Por tanto, en la realidad, en este tramo el flujo se repartiría en tres tuberías idénticas de menor diámetro que conducirían a la entrada de los filtros. Esto no ha sido considerado en los cálculos, por lo que es probable que la pérdida de carga real del tramo 2 sea ligeramente superior a la esperada. Lo mismo ocurre con las corrientes del tramo 3, ya que tendría lugar una unión de los flujos procedentes de los tres filtros en paralelo antes de entrar al compresor CP-I.3.

Por otro lado, en las corrientes 7.1 y 7.2 la temperatura del aire no es constante, por lo que los cálculos del diámetro de tubería están hechos, siguiendo un criterio conservador, para la temperatura de aire máxima en ese tramo (180 °C), que implica usar un diámetro más grande. De esta manera se asegura que el match en este tramo de tubería no supera el valor de 0.3.

6.2.2.2. Sección III

En la Sección III, se trabaja por cada tramo con un número variado de tuberías en paralelo, iguales entre sí, que se unen y se separan a lo largo del proceso. En este caso, las pérdidas de fricción para cada una de las tuberías que componen un tramo son las mismas.

No se han realizado los cálculos correspondientes a los tramos de las corrientes de purga (28 y 31) porque no se sabe con certeza el uso de estas corrientes. Por ejemplo, en función de que la corriente se destine a refrigeración o se deseche, la longitud de la tubería, el número de accesorios y las condiciones operativas varían significativamente, siendo estos parámetros fundamentales para los cálculos.

En las Tablas XVIII, XIX y XX se muestran las principales características de cada tramo de tuberías incluyendo los diámetros obtenidos de cada tubería según el procedimiento explicado en el apartado 1.2.1. Una vez obtenido el diámetro de cada tubería se procede a calcular las pérdidas por fricción de cada tubería donde el término h_L engloba las pérdidas por los tramos rectos ($h_{Tramos Rectos}$) y las pérdidas de los accesorios ($h_{accesorios}$).

En la bibliografía («FLOW OF FLUIDS» 2010) se ha encontrado la longitud equivalente, en metros de tubería de distintos accesorios. A este valor se le ha añadido los diez metros adicionales por cada tubería y a partir de la Ecuación 1 se obtienen las pérdidas de carga de cada tubería en los distintos tramos.

A nivel industrial la unión y separación de las tuberías se realiza mediante colectores, pero como se desconocen las pérdidas de fricción originadas por estos accesorios, se ha buscado su equivalente en los accesorios, a partir de la diferencia entre el número de tuberías en paralelo entre tramos consecutivos. Cabe destacar que este número es una estimación y puede variar según los requerimientos de operación de la planta. Además, no se han tenido en cuenta las pérdidas por contracción y ensanchamiento brusco, considerándose despreciables.

Finalmente, a partir de los datos de las Tablas B.III y B.IV y la Ecuación 7 se calcula la carga que debe aportar la bomba para los tramos de corriente líquida comprendidos entre la corriente 22 y 35. En la Tabla XVIII se muestran los valores de carga (m) que debe suministrar cada bomba en cada tramo y aquellos que sean positivos indican la necesidad de un equipo de impulsión.

Según las reglas heurísticas, los caudales de flujo y la carga de los entran en el rango de operación de las bombas centrífugas simples (1.4 a 1363.8 m³/h, Carga máxima ($H_{m\acute{a}x}$))

152.4 m). En la Tabla XVIII, a partir de los valores positivos de H_B y de la eficiencia de la bomba se calcula la H_{real} (en m):

$$H_{Real} = \frac{H_B}{\eta} \quad [10]$$

Para estos cálculos se ha utilizado la eficiencia correspondiente a las bombas centrífugas, un 70% para los tramos 22.23,24 y 25. Por otro lado se ha optado por elegir un 75% para los tramos 26 y 29 (Walas 1998).

Tabla XVIII. Carga (m) requerida por una bomba en cada tramo.

NºCorriente por tramo	22.23	24	25	26	30	27	29	32.33	34	35
Q _{TOTAL} (m³/h)	149.0	149.0	149.0	768.0	115.2	652.8	619.0	34.6	34.6	33.5
Q _{TUBERIA} (m³/h)	29.8	74.5	1.6	8.3	4.1	7.1	6.7	1.2	8.6	1.2
H (m)	89.87	0.32	0.60	0.33	-9.46	-9.97	10.42	-19.07	-33.86	-4.73
H _{real} (m)	128.39	0.46	0.85	0.44	-	-	14.89	-	-	-

En este proceso el número necesario de bombas por cada tramo no tiene por qué coincidir con el número de tuberías en paralelo. Por ejemplo, en el caso del tramo 29, no sería eficiente instalar 92 bombas individuales ya que resulta más adecuado unir varias corrientes para impulsarlas, y posteriormente volver a separarlas. De esta forma se reducen los costes de los equipos y la complejidad operativa es menor.

La optimización del número de bombas en cada tramo queda fuera del alcance de este proyecto por lo que se asume que se emplea una única bomba por tramo, encargada de impulsar el caudal total.

Finalmente, dentro del amplio catálogo de bombas centrífugas se ha seleccionado los modelos que se observan en la Figura 11. Para los tramos 22.23,24 y 25 se usará una bomba de la Gama Packo, mientras que para los tramos 26 y 29 se usará una de la gama Shallowglide.

En el Apartado III.5.1.9 de evaluación económica de la sección III, se calcula el precio de compra de las bombas.

En los tramos de las corrientes 36 al 39, circula una corriente gaseosa de H_2 con una pequeña fracción de vapor de agua donde se ha fijado una velocidad de circulación de 20 m/s que corresponde al valor máximo recomendado para gases en intercambiadores de carcasa y tubos (Peters, Timmerhaus y West 2003). Esta velocidad se emplea para determinar el diámetro mínimo de cada tubería y las pérdidas de carga por tubería, tal como indica el procedimiento desarrollado en el Apartado 6.2.1.



(A)



(B)

Fig. 14. Bombas utilizadas para la impulsión de fluidos en la Sección II. (A) bomba centrífuga de la Gama Packo (Presión máxima de 40 bar y caudal máximo de 800 m³/h)(«Packo General Industrial Series - Bomba centrífuga by Verder Liquids | DirectIndustry»). (B) bomba centrífuga de la gama Shallowglide (H_{Máxima} de 130 m y caudal máximo de 30 000 m³/h) («Swallowglide - Bomba centrífuga by Celeros | DirectIndustry»)

En cuanto a las pérdidas por carga de los accesorios, solo se han tenido en cuenta en el tramo de la corriente 34 donde se produce la unión de 29 tuberías. En la tablas XIX y XX se muestran los resultados obtenidos, y en las tablas B.IV y B.V del Apéndice B todos los datos empleados para llevar a cabo estos cálculos.

Tabla XIX. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección III. Parte 1

	22.23	24	25	26	30	27	29	32.33
Tramos en paralelo	5	2	92	92	28	92	92	28
Flujo másico (kg/s)	8.3	20.7	0.4	2.3	1.1	2.0	1.9	0.3
Velocidad (m/s)	1.3	1.46	0.97	1.07	1.18	1.04	0.98	0.74
Número de mach	-	-	-	-	-	-	-	-
Diámetro mínimo(m)	0.088	0.132	0.024	0.05	0.036	0.046	0.045	0.021
Diámetro normalizado (m)	0.090	0.135	0.024	0.052	0.035	0.049	0.049	0.024
Factor de fricción (Fanning)	0.0045	0.004	0.0064	0.0052	0.0056	0.0053	0.0054	0.0069
Pérdida de carga tubería (m)	0.17	0.13	0.51	0.23	0.46	0.24	0.22	0.32
Pérdida de carga accesorios (m)	0.00	0.20	0.10	0.10	0.29	0.00	0.00	0.00

Tabla XX. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección III. Parte 2

	34	35	36	36.2	36.3	37	38	40
Tramos en paralelo	4	29	1	1	1	1	1	1
Flujo másico (kg/s)	2.3	0.3	0.78	0.78	0.78	0.78	0.78	0.76
Velocidad (m/s)	2.40	0.30	0.78	0.78	0.78	0.78	0.78	0.77
Número de mach	-	-	0.014	0.012	0.015	0.013	0.015	0.015
Diámetro mínimo (m)	0.050	0.020	0.502	0.373	0.323	0.256	0.236	0.256
Diámetro normalizado (m)	0.052	0.021	0.514	0.373	0.325	0.257	0.236	0.257
Factor de fricción (Fanning)	0.0052	0.0051	0.0077	0.0083	0.0087	0.0093	0.0096	0.0093
Pérdida de carga tubería (m)	0.24	0.46	12.46	18.24	21.92	29.79	33.14	29.72
Pérdida de carga accesorios (m)	0.60	0.07	938.84	0	0	0	0	0

6.2.2.3. Sección V

En la última sección del proceso se parte de una mezcla gaseosa que se condensa parcialmente, resultando una mezcla líquido-gas, formada por el amoníaco (condensable) e hidrógeno, nitrógeno, argón y oxígeno (se pueden considerar incondensables a las condiciones de presión y temperatura de trabajo).

En la corriente previa a la condensación, la mezcla se encuentra en estado gas y tras esta etapa de cambio de fase, se obtiene una mezcla bifásica, en cambio, la cantidad de condensado es mucho menor que la de la fase gaseosa. Por otro lado, los separadores de fases, van a conseguir que estas sean independientes, por tanto, por cabezas se obtiene una corriente gaseosa y por colas, líquida. Al llevar a cabo la simulación en Aspen HYSYS, se comprueba que, al mezclar las dos corrientes líquidas de colas de los dos separadores, debido a la diferencia de temperatura, se forma una fase vapor pero esta se asume despreciable, ya que está presente en una proporción minoritaria, aunque es importante ser consciente de su existencia. En otras palabras, la parte crítica es aquella comprendida entre el condensador y el separador de fases, ya que, es donde existe un flujo bifásico notable.

Cuando existen dos fases, se pueden dar patrones de flujo distintos en conducciones horizontales. Determinar cuál de estos patrones se adapta mejor al sistema es una tarea complicada, que puede requerir de prácticas experimentales, pero esto no siempre puede llevarse a cabo. Por tanto, se decide emplear el mapa de Baker, en el que, a partir de los parámetros de Baker, se puede obtener el patrón de flujo. (Instituto Tecnológico de Minatitlán 2020). Estos parámetros de Baker se obtienen con las ecuaciones 11 y 12, que relacionan distintas propiedades físicas de las dos fases.

$$B_x = 0.0341 \frac{W_L \rho_G^{\frac{1}{2}} \mu_L^{\frac{1}{3}}}{W_G \sigma_L \rho_L^{\frac{1}{6}}} \quad [11]$$

$$B_y = 7.092 \frac{W_G}{A \sqrt{\rho_G \rho_L}} \quad [12]$$

Las dos corrientes con flujo bifásico son las indicadas en la Figura 9, que es el diagrama de flujo global, con los números 48 y 50. Se recogen ciertas propiedades físicas, así como el flujo másico para ambas en la Tabla XXI, y se calculan B_x y B_y , con las ecuaciones 11 y 12. También hace falta conocer el área transversal de flujo (A), que, para calcularla, se considera que la velocidad máxima del gas es de 6 m/s.

Con estos valores de B_x y B_y , se acude al mapa de Baker, Figura 15, para estimar el patrón de flujo en el sistema gas-líquido, situando en el eje de abscisas el valor de B_x y

ordenadas, B_y , como se muestra a continuación. Las líneas azules representan la primera corriente condensada y, las rojas, la segunda.

Se comprueba entonces, que se trata de un patrón de flujo anular. Es decir, el líquido tiende a formar una película adherida a las paredes de la conducción, mientras que, el gas fluye por el centro de esta. («Perry's Chemical Engineers' Handbook, 9th Edition» 2018)

Tabla XXI. Parámetros de Baker tras las dos condensaciones.

Propiedad	Corriente 48		Corriente 50	
	Líquido	Gas	Líquido	Gas
Densidad (kg/m^3)	588	73.81	675	83.45
Viscosidad (Pa.s)	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$1.12 \cdot 10^{-3}$	$6.1 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}
Flujo másico (kg/h)	4630	72546	21343	52251
Velocidad (m/s)	$4.7 \cdot 10^{-2}$	6	0.23	6
D mínimo (mm)	57.8		36.9	
D nominal (mm)	58.98		38.14	
A (m^2)	$2.7 \cdot 10^{-3}$		$1.1 \cdot 10^{-3}$	
Tensión superficial (kgf/m)	$2.55 \cdot 10^{-3}$		$4.07 \cdot 10^{-3}$	
Bx	0.18		0.5	
B_y	$5.4 \cdot 10^4$		$4.90 \cdot 10^4$	

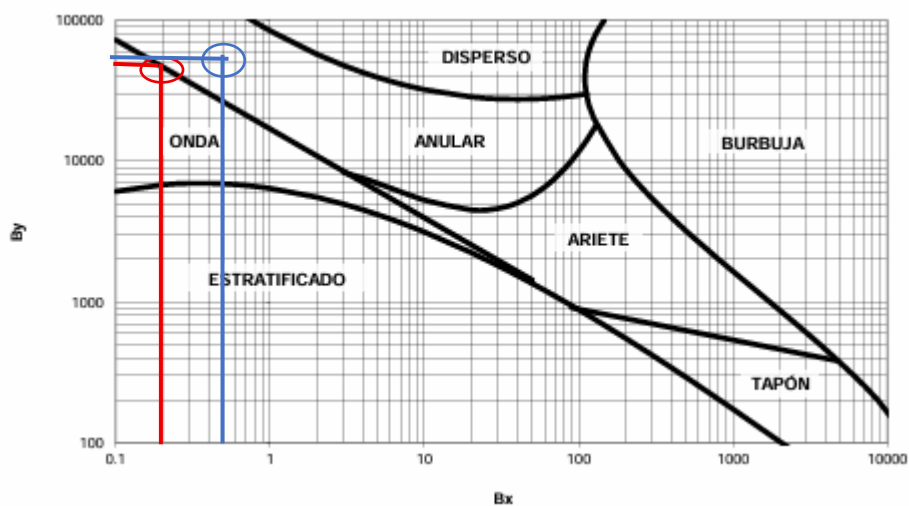


Fig.15.Mapa de Baker.

Ante este caso, el método más sencillo para calcular las pérdidas por fricción para un flujo bifásico, es estimar las de cada fase de manera individual y, a continuación, relacionarlas por medio de un factor de corrección Φ , de manera que se cumpla la Ecuación 13. A partir de este momento el subíndice 'L' representa a la fase líquida y 'G', a la fase gas (Walas 1988)

$$\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_{2\text{ fases}} = \Phi_i \left(\frac{\Delta P}{L}\right)_i \quad [103]$$

Mediante las ecuaciones 14 y 15, se calcula el número de Reynolds para el líquido y para el gas, para obtener así, empleando la Ecuación 16 el factor de fricción para cada fase. Esta es la Ecuación de Blasius y solamente se puede aplicar para $Re > 2000$. Conocidos estos valores, se puede calcular la caída de presión por unidad de longitud para el líquido y para el gas, con las ecuaciones 17 y 18.

$$Re_G = 7.092 \frac{W_G}{A \sqrt{\rho_G \rho_L}} \quad [114]$$

$$Re_L = \frac{D \cdot G \cdot (1 - x)}{\mu_L} \quad [125]$$

$$f = \frac{0.32}{Re^{0.25}} \quad [16]$$

$$\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_G = \frac{f_G G^2 x^2}{2D\rho_G} \quad [137]$$

$$\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_L = \frac{f_L G^2 (1 - x)^2}{2D\rho_L} \quad [18]$$

Donde x representa la fracción másica vaporizada, que se puede obtener a partir de la fracción vaporizada calculada en el apartado V.3.1.3, la cual toma un valor de 0.94.

Conocidas las caídas de presión por unidad de longitud respectivas a cada una de las fases, se calcula el parámetro X de Lockhart-Martinelli, empleando la Ecuación 19.

$$X = \sqrt{\frac{\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_L}{\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_G}} \quad [14]$$

Los resultados de todas estas ecuaciones se pueden observar en la Tabla XXII para las corrientes 48 y 50. Conocido el valor de X , se emplea la correlación de Lockhart-Martinelli para obtener el factor de corrección Φ para cada una de las fases, con las ecuaciones 20 y 21.

$$\Phi_L = \sqrt{1 + \frac{C}{X} + \frac{1}{X^2}} \quad [20]$$

$$\Phi_G = \sqrt{1 + CX + X^2} \quad [21]$$

Por último, se recurre a la Ecuación 13 para estimar la caída de presión por unidad de longitud para la mezcla bifásica, empleando Φ_G , que se considera la fase continua al estar en mayor proporción. Los resultados se muestran a continuación para una longitud de tubería de 10 m:

$$\Delta P_{bifásico_{48}} = 2.28 \text{ Pa}$$

$$\Delta P_{bifásico_{50}} = 1.28 \text{ Pa}$$

Tabla XXII. Pérdidas de fricción del líquido y gas para las corrientes 48 y 50 y parámetro X.

Corriente	48	50
Re_L	$7.14 \cdot 10^6$	$1.27 \cdot 10^6$
f_L	$6.19 \cdot 10^{-3}$	$9.54 \cdot 10^{-3}$
$\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_L \text{ (Pa/m)}$	$2.73 \cdot 10^{-5}$	$6.6 \cdot 10^{-4}$
Re_G	$9.60 \cdot 10^4$	$9.70 \cdot 10^5$
f_G	$1.82 \cdot 10^{-2}$	$1.02 \cdot 10^{-2}$
$\left(\frac{\Delta P}{L}\right)_G \text{ (Pa/m)}$	$1.86 \cdot 10^{-1}$	$3.33 \cdot 10^{-2}$
X	82.02	7.09

Por otra parte, las corrientes 57-58 y 62-66 transportan líquidos, por tanto, se aplica el procedimiento descrito en el apartado 1.3.2.1. para estimar las pérdidas por fricción. Las corrientes 57 y 58 se encuentran a elevada presión, próxima a las 200 atmósferas y realizando los cálculos, se comprueba que la carga de la bomba (H) sería inferior a 1. Por ello, se decide no instalar bombas en estas tuberías, sin embargo, sí que se considera un codo de 90° en cada una de ellas. También se van a tener en cuenta dos válvulas para aquellas corrientes en las que sea necesario reducir la presión. Para calcular las pérdidas de fricción a través de la válvula se utiliza la Ecuación 22.

$$h = K_v \frac{u^2}{2g} \quad [152]$$

Siendo:

h: pérdida de carga en la válvula

K_v : coeficiente de caudal de la válvula (suministrado por el fabricante) (m^3/h bar)

u: velocidad del fluido en la conducción

g: fuerza de la gravedad (m/s^2)

En cuanto a las corrientes 62 y 64, estas experimentan una reducción de presión considerable, desde cerca de las 200 atm hasta 1 atm, que se corresponde con la presión de almacenamiento del amoníaco. Esto se consigue gracias a una válvula reductora de presión, como la mostrada en la Figura 16a, del proveedor Valfonta, modelo PRV20. Esta posee un pistón que permite suministrar una presión constante a la salida, así como cerrar la apertura en caso de un aumento de la presión aguas abajo. Puede reducir la presión desde los 20 bar-g hasta los 5 bar-g (unidades manométricas, equivalente a 6 bar). Es importante tener en cuenta que esta válvula solo se puede instalar en tuberías de diámetro pequeño, por tanto, esta únicamente servirá para la corriente 62 cuyo flujo másico es bajo (1.43 kg/h).

La válvula mostrada en la Figura 16b promete ser sencilla de instalar y no requiere tareas de mantenimiento. Sin embargo, el fabricante advierte de que es recomendable instalar una válvula de seguridad entre 0.5 y 1 metro aguas abajo de esta, con el fin de proteger el sistema ante sobrepresiones. El coeficiente de flujo Kv, suministrado por el fabricante, en este caso es de $1.2 \text{ m}^3/\text{h bar}$. Para la corriente 64 en cambio, se decide instalar otra válvula, en este caso, del proveedor Arca, que es la Figura 16b.

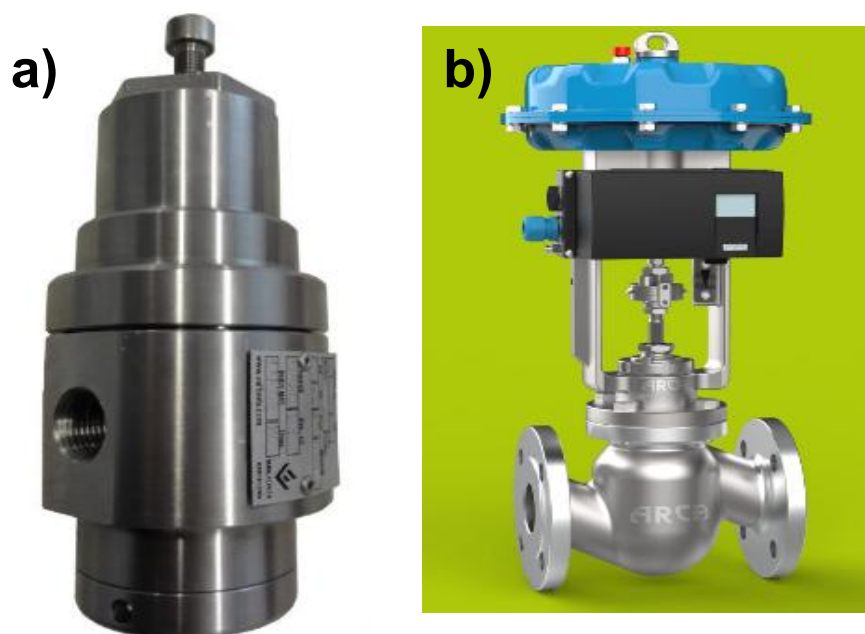


Fig. 16. A) Válvula reductora de presión para la corriente 62.(Valfonta 2016). B) Válvula reductora de presión para la corriente 64. («ECOTROL® modular straight-way control valve | ARCA» 2025)

Este fabricante ofrece distintos modelos en función del tamaño del actuador. Si este es grande, la respuesta que ofrece la válvula es más lenta, por tanto, el control sobre el proceso se ve limitado. Por ello, se decide escoger, para el diámetro nominal correspondiente, el menor tamaño de actuador (320 cm^2) en aras de preservar la seguridad de la operación, con asiento de 80 cm de diámetro. Para estas dimensiones Kv toma un valor de $40 \text{ m}^3/\text{h bar}$ (Ecotrol 2020). Tanto la corriente 62 como la 64, se considera que poseen un codo de 90° , así como una unión en forma de T, que permita mezclar ambas corrientes sin ocasionar problemas. Los actuadores de ambas válvulas deben funcionar de manera controlada, para evitar el golpe de ariete. Por este mismo motivo, en las corrientes 57 y 58 se decide no instalar ninguna bomba, ya que, la carga de estas sería muy baja y quizá ocasionaría más problema forzar el paso a través de estas, así como un aumento en los costes y siempre que sea posible se tratará de mover los fluidos por gravedad.

Por otro lado, las corrientes 47, 49, 51-55, 56 y 61 transportan una mezcla gaseosa. En este caso, se recurre al procedimiento explicado en el apartado 1.3.1. Se considera una velocidad máxima del gas de 6 m/s y en base a esta y conociendo el flujo másico, se calcula el diámetro

En la Tabla XXIII y XXIV, se muestra una recapitulación de los resultados obtenidos, mientras que, en la Tabla B.VI (Apéndice B) se pueden ver los cálculos en mayor detalle.

Tabla XXIII. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección V. Parte 1.

	47		48		49		50		51	52	53	54
Fase	Gas	Líquido	Gas	Gas	Líquido	Gas	Gas	Gas	Gas	Gas	Gas	Gas
Flujo másico (kg/s)	21.438	1.286	20.152	20.443	5.928	14.514	17.353	0.246	0.246	17.107		
Velocidad (m/s)	6.800	0.047	6.000	6.000	0.230	6.000	6.000	6.000	6.000	6.000	6.000	6.000
Número de mach	0.305	-		0.184	-		0.145	0.002	0.425	0.148		
Diámetro mínimo (m)	0.343	0.240		0.240	0.210		0.200	0.024	0.340	0.200		
Diámetro normalizado (m)	0.346	0.243		0.243	0.219		0.205	0.024	0.343	0.203		
Factor de fricción (fanning)	0.014	0.006	0.018	0.014	0.010	0.010	0.014	0.014	0.015	0.148		
Pérdida de carga tubería (m)	4.000	0.003		4.000	0.002		5.000	43.000	3.000	5.000		
Pérdida de carga accesorios (m)	-	-		-	-		-	-	-	-		

Tabla XXIV. Diámetro de tubería para las corrientes de la sección V. Parte 2.

	55	56	57	58	59	61	62	64	66
Fase	Gas	Gas	Líquido	Líquido	Líquido	Gas	Líquido	Líquido	Líquido
Flujo másico (kg/s)	17.107	17.107	0.995	3.090	4.086	0.015	0.000	4.070	4.070
Velocidad (m/s)	6.000	6.000	1.420	1.480	1.480	6.000	0.019	1.700	1.420
Número de mach	0.141	0.208	-	-	-	0.011	-	-	-
Diámetro mínimo (m)	0.190	0.280	0.039	0.062	0.071	0.020	0.001	0.073	0.071
Diámetro normalizado (m)	0.194	0.288	0.039	0.063	0.074	0.017	0.006	0.074	0.074
Factor de fricción (fanning)	0.014	0.014	0.004	0.004	0.004	0.014	0.027	0.003	0.004
Pérdida de carga tubería (m)	5.000	4.000	0.405	0.273	0.216	65.000	$3.267 \cdot 10^{-3}$	0.259	0.208
Pérdida de carga accesorios (m)	-	-	4.089	6.586	3.706	-	0.120	0.245	-

7. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA

7.1. INTRODUCCIÓN

El análisis *pinch* es una de las metodologías más empleadas en la integración energética y tiene como objetivo optimizar el uso del calor de las corrientes del proceso minimizando las necesidades de servicios externos de calefacción o refrigeración. El “*pinch point*” (o “punto de pliegue” en español) en un gráfico temperatura-entalpía señala un punto que divide el sistema en dos regiones termodinámicas distintas. Por encima del *pinch*, el sistema actúa como sumidero de calor, debiendo recibir únicamente calor a de los servicios auxiliares; por debajo del *pinch* sucede lo contrario, el calor debe fluir hacia los servicios auxiliares, es decir, solo se debe usar refrigeración. A través del *pinch* no debe existir transferencia de calor porque si se incumple esta condición el consumo de servicios calientes y fríos superaría los valores mínimos a alcanzar (Sinnott 2005).

El primer paso es recopilar toda la información de las corrientes calientes y frías del proceso, así como sus temperaturas iniciales (T_{in}) y finales (T_{out}). Para cada corriente, se calcula el cambio de entalpía de dos formas: a partir del flujo másico correspondiente y el calor específico (C_p) para estimar calores sensibles, o a partir de la entalpía de cambio de fase para calores latentes. Posteriormente, se calcula el término CP de cada corriente como el cociente de la variación de entalpía por su variación de temperatura (ΔT).

En las Tablas XXV y XXVI se recoge la información de las corrientes de cada una de las secciones (Fig.I.1, Fig.II.1, Fig.III.1, Fig.IV.1 y Fig.V.1) consideradas en la integración energética. En el caso de las corrientes V.47 y V.49 que son mezclas bifásicas, la variación de entalpía se calcula como la suma del calor sensible de toda la corriente y el calor latente del compuesto condensado.

Tabla XXV. Datos de las corrientes extraídas de la sección V para la integración energética.

Corriente	V.47	V.49	V.61	V.64	V.55
T_{in} (°C)	417.0	25.0	-12.9	-12.9	-34.9
T_{out} (°C)	25.0	-30.0	-142.8	49.7	200.0
ΔT (°C)	-392.0	-55.0	-129.9	62.6	235.0
m total (kg/h)	77 177	73 594	-	-	61 583.7
m condensado(kg/h)	4 356	11 180	-	-	-
C_p (kJ/kg°C)	3.5	3.7	-	-	3.684
λ (kJ/kg)	1 163	1 163	-	-	-
ΔH (kW)	-3 0694	-7 739	20.62	-1 262.22	-14 809.9
CP (kW/°C)	78.3	140.7	0.2	20.2	63.0
Tipo	Caliente	Caliente	Caliente	Fría	Fría

Tabla XXVI. Datos de las corrientes extraídas de las secciones I a IV para la integración energética.

Corriente	T _{in} (°C)	T _{out} (°C)	ΔT (°C)	m (kg/h)	Cp (kJ/kg°C)	ΔH (kW)	CP (kW/°C)	Tipo
I.3.1	195.0	15.0	-180.0	18 888.0	1.03	-974.6	5.4	Caliente
I.8.1	110.0	15.0	-95.0	16 999.0	1.03	-462.9	4.9	Caliente
I.8.3	110.0	15.0	-95.0	16 999.0	1.03	-462.9	4.9	Caliente
II.9	15.0	-85.0	-100.0	16 999.0	1.08	-511.4	5.1	Caliente
II.16	-194.0	-100.0	94.0	12 849.0	1.05	350.9	3.7	Fría
II.21	-181.6	50.0	231.6	4 080.0	0.85	224.7	1.0	Fría
III.34	16.0	85.0	69.0	33 486.7	4.19	2 691.8	39.0	Fría
III.36.2	200.0	56.0	-144.0	2 822.2	14.00	-1 579.9	11.0	Caliente
III.37	106.2	50.0	-56.2	2 822.2	13.93	-800.2	11.0	Caliente
IV.16.3	42.0	25.0	-17.0	1 2849.0	1.04	-63.1	3.7	Caliente
IV.16.5	129.1	50.0	-79.1	1 2849.0	1.04	-294.2	3.7	Caliente
IV.16.7	162.8	100.0	-62.8	1 2849.0	1.04	-233.8	3.7	Caliente
IV.40	50.0	25.0	-25.0	2 753.8	1.05	-20.0	0.8	Caliente
IV.40.2	99.1	60.0	-39.1	2 753.7	14.41	-431.0	11.0	Caliente
IV.40.4	142.8	90.0	-52.8	2 753.7	14.46	-584.0	11.1	Caliente
IV.40.6	180.2	130.0	-50.2	2 753.7	14.49	-556.4	11.1	Caliente
IV.46	451.0	400.0	-51.0	77 312.9	4.34	-4 756.4	93.3	Caliente

7.2. CURVAS COMPUESTAS CALIENTE Y FRÍA

A partir de la representación de las curvas compuestas calientes y frías es posible obtener las necesidades de calefacción y refrigeración del proceso. Para ello se crea una lista para cada tipo de corriente (caliente o fría), identificando los distintos intervalos de temperatura. En cada uno de los tramos se calcula el valor de CP como el sumatorio de los CP individuales; las corrientes calientes van con signo positivo, y las corrientes negativas con signo negativo. El inverso del CP total de cada intervalo corresponde a la pendiente de la curva en el diagrama temperatura frente a entalpía.

Posteriormente la variación de entalpía de cada tramo (ΔH) es el producto entre el CP total y la variación de temperatura.

En la Tabla XXVII se muestra a modo de ejemplo la cascada de energía para la construcción de la curva compuesta fría, así como los cálculos realizados para las corrientes frías, donde se ha optado por asignar un valor de 0 kW a ΔH a la temperatura más baja. Después, en las tablas B.VII y B.VIII del apéndice se muestran los cálculos realizados para trazar la curva compuesta caliente. Finalmente, en la Figura 17 se representan las curvas compuestas caliente y fría en el diagrama temperatura frente a entalpía a partir de los valores de las tablas XXVII, B.VII y B.VIII.

Tabla XXVII. Cascada de energía para la curva compuesta fría.

$T_{\text{fría}}$ (°C)	II.16	II.21	III.34	V.64	V.55	ΔT (°C)	ΣCP (kW/°C)	$\Delta H_{F,\text{int}}$ (kW)	ΔH_F (kW)
200.0									19 333.8
85.0					63.0	115.0	63.0	7 247.4	12 086.4
50.0			39.0		63.0	35.0	102.0	3 571.1	8 515.3
49.7		1.0	39.0		63.0	0.3	103.0	30.9	8 484.4
16.0		1.0	39.0	20.2	63.0	33.7	123.2	4 151.0	4 333.4
-12.9		1.0		20.2	63.0	28.9	84.2	2 432.3	1 901.0
-34.9		1.0			63.0	22.0	64.0	1407.8	493.2
-100.0		1.0				65.0	1.0	63.1	430.1
-181.6	3.7	1.0				81.6	4.7	383.8	46.3
-194.0	3.7					12.0	3.7	46.3	0.0

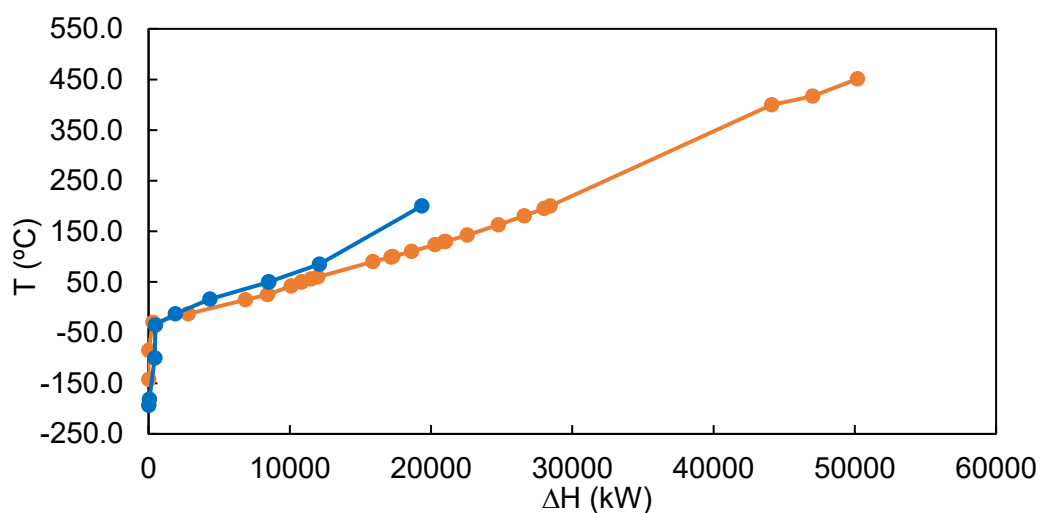


Fig.17. Curvas compuestas caliente y fría.

En la Figura 17 se observa que las curvas compuestas se cruzan, un suceso termodinámicamente imposible ya que la transmisión de calor de una corriente fría a una caliente nunca puede darse de forma espontánea. Por lo tanto, es necesario desplazar la curva compuesta fría que, en vez de comenzar a trazarse desde los 0 kW, se comienza a trazar desde 30 852 kW (ver Figura 18).

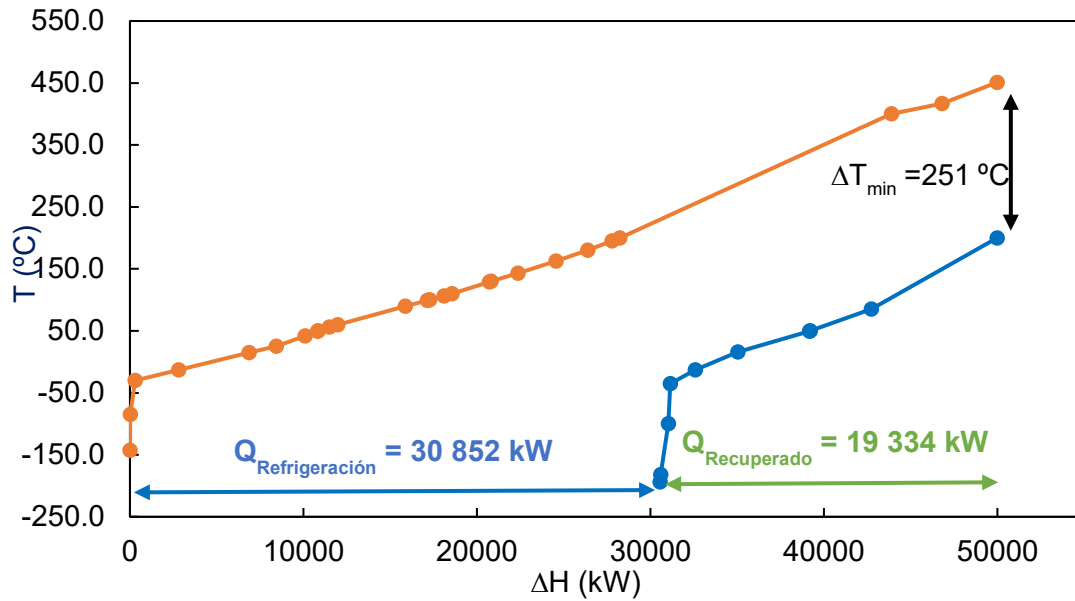


Fig. 18. Curvas compuestas caliente y fría ($\Delta T_{\min}$ de 251 °C).

En la Figura 18 se observa que no existen requerimientos de calefacción externa, ya que se trata de un problema umbral de refrigeración, donde todas las corrientes calientes se pueden emplear para cubrir las necesidades térmicas de las corrientes frías. Además, al disminuir la $\Delta T_{\min}$ del proceso se observa que las necesidades de refrigeración externa permanecen constantes. Este comportamiento se puede observar en la Figura B.3 del Apéndice B. Por lo tanto, las necesidades mínimas de servicios externos serían 30 852 kW de refrigeración y 0 kW de calefacción.

7.3. CURVA COMPUESTA GLOBAL

Un método para determinar la temperatura del pinch y los servicios mínimos de refrigeración y calefacción, es la construcción de la curva compuesta global. En este método se emplean las temperaturas desplazadas de cada corriente según las Ecuaciones 23 y 24, donde el asterisco (*) indica las temperaturas desplazadas, y los subíndices “C” y “F” significan “caliente” y “frío” respectivamente.

$$T_C^* = T_C - \frac{\Delta T_{\min}}{2} \quad [23]$$

$$T_F^* = T_F + \frac{\Delta T_{\min}}{2} \quad [24]$$

Los valores recomendados de $\Delta T_{\min}$ dependen de la naturaleza física de las corrientes involucradas. En el proceso hay corrientes líquidas y mezclas bifásicas, pero predominan las gaseosas. Por este motivo, se ha optado por emplear el valor de $\Delta T_{\min}$ recomendado para gases, que son 20 °C (Smith 2005). A pesar de que se podría reducir este valor para algunas corrientes, los resultados obtenidos son conservadores garantizando un diseño factible para la implementación real del sistema. Después de calcular y ordenar las temperaturas desplazadas de todas las corrientes, se calcula el CP de cada intervalo mediante la siguiente ecuación:

$$\sum CP_{int} = \sum CP_{C,int} - \sum CP_{F,int} \quad [25]$$

Finalmente, la variación de entalpía del intervalo (ΔH_{int}) se calcula al multiplicar el sumatorio de las CP de cada intervalo ($\sum CP_{int}$) y la variación de temperatura (ΔT^*_{int}) en dicho intervalo. A modo de ejemplo en la Tabla XXVIII se muestra el cálculo para las corrientes de la sección III. Por otra parte, los resultados para el resto de las corrientes del proceso se recogen en las tablas B.IX y B.X del Apéndice B.

Tabla XXVIII. Ejemplo de cálculo de variación de ΔH_{int} para las corrientes de la sección III.

T* (°C)	III.34	III.36.2	III.37	ΔT^*_{int} (°C)	$\sum CP_{int}$ (kW/°C)	ΔH_{int} (kW)
190						
96.2		11.0		93.8	11.0	1 031.8
95		11.0	10.9	1.2	21.9	31.3
46	39.0	11.0	10.9	49	-17.1	-837.9
40	39.0		10.9	6	-28.1	-168.6
26	39.0			14	-39.0	-546.0

Una vez que se obtienen los valores de ΔH_{int} , se construye la cascada de energía partiendo desde los 0 kW en el intervalo superior (mayor temperatura), y sumándole los valores de ΔH_{int} siguientes. En la Tabla XXIX se muestra un resumen de la cascada de energía con los puntos más importantes; en la Tabla B.XI se muestra la tabla completa. La temperatura del punto de pliegue corresponde a aquella donde $\Delta H_{acumulada}$ es 0 kW/°C.

Al representar los valores de temperatura ajustada frente a entalpía acumulada utilizando los datos de la (Tabla B.XI) se obtiene la curva compuesta global del proceso. A partir de ella se determina el *pinch* (441 °C en temperaturas desplazadas) y los servicios auxiliares requeridos. En este caso, dado que se trata de un problema umbral de solo refrigeración, el *pinch* se encuentra en la temperatura más alta de la curva; por tanto, no se observa dos regiones termodinámicamente separadas, sino una única región que está por debajo del *pinch* y cuyas necesidades de refrigeración son de 30 852 kW.

Tabla XXIX. Resumen de la cascada de energía del proceso.

T* (°C)	ΔH _{int} (kW)	ΔH _{acumulada} (kW)	Servicios
441.0	3 171.0	0.0	Pinch
407.0	2 916.6	3 171.0	
.....			
185.0	130.9	20 618.8	
.....			
95.0	84.8	24 996.7	
.....			
-24.9	165.7	28 841.6	
.....			
-172.0	-105.2	30898.2	
-184.0	-44.8	30851.9	Refrigeración

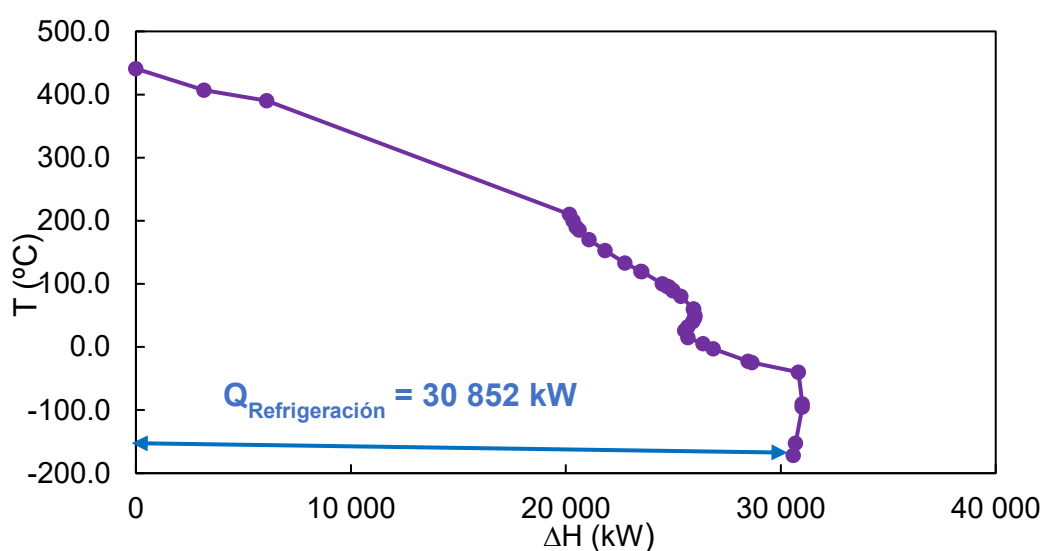


Fig. 19. Curva compuesta global con servicios y temperatura máxima de suministro.

7.4. TOPOLOGÍA DE LA RED DE CAMBIADORES DE CALOR

Una vez determinados los servicios energéticos mínimos, se procede a diseñar la topología de la red de cambiadores de calor, con el objetivo de minimizar el uso de servicios externos y aprovechar al máximo la energía disponible en las corrientes del proceso.

Dado el elevado número de corrientes presentes en la integración, las posibilidades son múltiples. El siguiente diseño estudia algunos de los posibles acoplamientos entre corrientes frías y calientes con el objetivo de cubrir las necesidades de calefacción del proceso.

En el apartado 1.1 se obtuvo que la temperatura del *pinch* es de 441 °C, en temperaturas desplazadas; a partir de las Ecuaciones 23 y 24 se determina las temperaturas reales del *pinch*, siendo 451 °C la temperatura caliente (T_C) y 431 °C la temperatura fría (T_F), manteniendo una $\Delta T_{\min}$ de 20°C.

Al tratarse de un problema umbral de solo refrigeración, todas las corrientes se encuentran por debajo del *pinch* y solo la corriente IV.46 pasa por él. Por lo tanto, no hay emparejamientos entre corrientes que pasan por el *pinch*. De este modo se procede emparejar las corrientes lejos del *pinch* con el objetivo de agotar la entalpía de las corrientes frías, ya que no se puede hacer uso de ningún servicio de calefacción para ello. En algunos casos, se han tenido que descartar algunos emparejamientos como las corrientes V.49 y V.55 o III.36.2 y III.34 ya que no se mantiene el $\Delta T_{\min}$ entre las salidas del cambiador.

Finalmente se obtienen dos configuraciones posibles:

- Red 1 (Figura 20): permite minimizar el número de equipos.
- Red 2 (Figura 21): esta otra alternativa empareja cada corriente fría con una o varias corrientes calientes de su misma sección o de la siguiente, reduciendo la distancia entre ellas.

En la primera configuración (Figura 20) se observa que mediante la corriente V.47 se satisfacen todos los requerimientos de calefacción del proceso; al requerir menos equipos de intercambio de calor supone una inversión menor en costes y mantenimiento. Sin embargo, las corrientes frías se encuentran dispersas a lo largo de la planta, lo que precisa de una red de tuberías más extensa y compleja, suponiendo un mayor coste en materiales y espacio, además de dificultades con los sistemas de control y temperatura.

Por otro lado, en la Red 2 (Figura 21) se precisa de 5 corrientes calientes en las que se ve favorecido el acoplamiento térmico entre estas y las frías, siempre cuando la diferencia de temperaturas entre ellas sea baja. Por último, como las corrientes acopladas están más próximas entre sí, la red de tuberías es más compacta y sencilla.

En conclusión, la Red 2 representa una mejor alternativa desde el punto de vista energético y de diseño, pese a requerir un mayor número de intercambiadores. Por el contrario, aunque la Red 1 ofrece ventajas en cuanto al número de equipos, esta se puede ver anulada debido a su menor eficiencia térmica y a necesitar una red hidráulica más compleja. Por lo tanto, aunque sería necesario estudiar ambas alternativas en mayor profundidad, en un principio el diseño de la Red 2 o similar se ajustaría mejor al este proyecto.

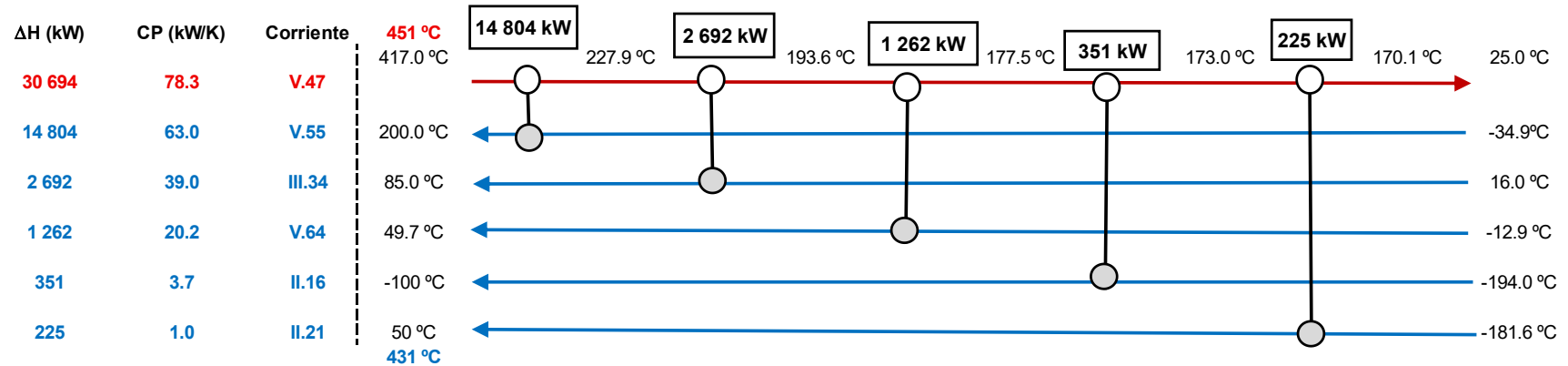


Fig.20. Red 1 de cambiadores de calor de las corrientes frías minimizando el número de intercambiadores de calor ($\Delta T_{\min} = 20^\circ\text{C}$).

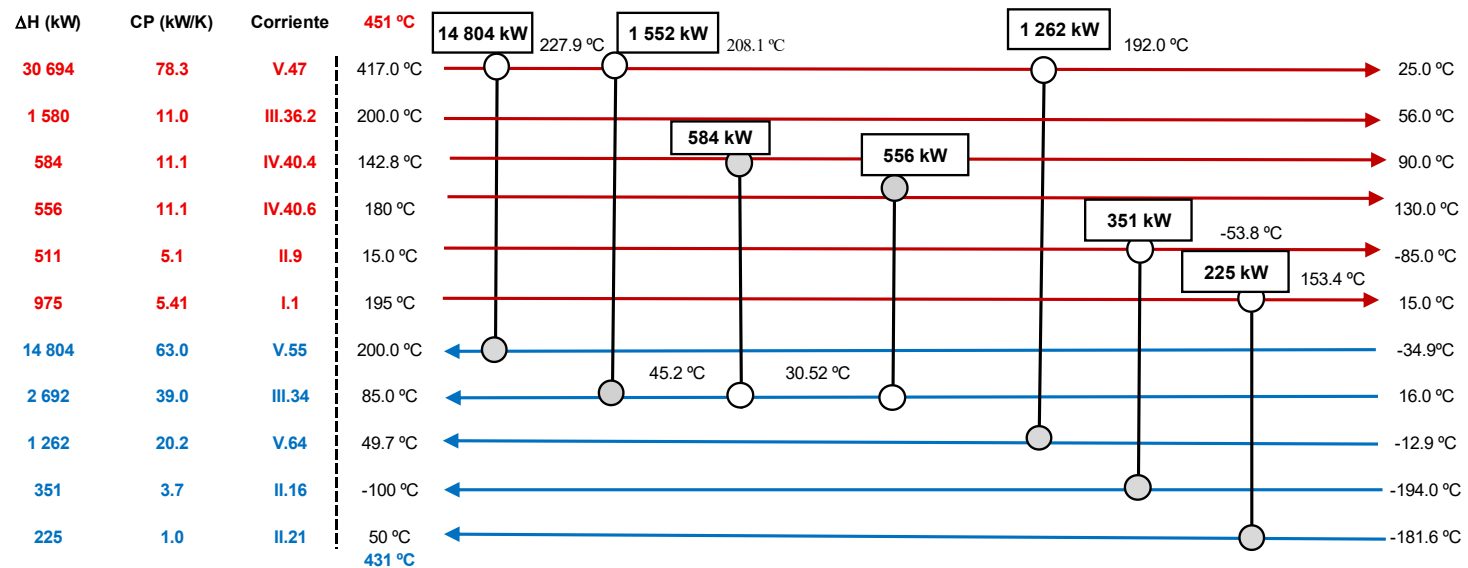


Fig.21. Red 2 de cambiadores de calor de las corrientes frías combinando corrientes de la misma sección o continua ($\Delta T_{\min} = 20^\circ\text{C}$).

8. CONSIDERACIONES DE SEGURIDAD E IMPACTO AMBIENTAL

8.1. ANÁLISIS DE RIESGOS

Los riesgos profesionales son situaciones potencial o contingentemente peligrosas ligadas al trabajo de forma directa o indirecta, y que puede materializarse en daños concretos. Dichos riesgos se clasifican de forma general en cinco categorías: mecánicos, físicos, químicos, biológicos y psicosociales. En una planta de producción de amoníaco no se trabaja con microorganismos, así que el riesgo biológico es muy bajo. Por otro lado, cada sección posee características diferentes, así que se analizarán los principales riesgos asociados a ellas.

Además de los riesgos asociados al propio proceso, las distintas sustancias que se utilizan a lo largo del proceso tienen riesgos inherentes. A continuación, se citarán algunas de las características de peligrosidad más destacables de cada una de las sustancias; para conocer las características completas de cada reactivo o producto, consultar las fichas de seguridad en la página web de la empresas Messer Ibérica de Gases (Messer Iberica de Gases S.A) y Sigma Aldrich (Sigma Aldrich 2022).

- **Amoníaco.** Gas inflamable que normalmente se almacena a alta presión, por lo que existe el riesgo de explosión en caso de calentamiento. Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves. Tóxico en caso de inhalación. Muy tóxico para organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.
- **Oxígeno.** Comburente, puede provocar o agravar un incendio. Normalmente se almacena a presión, por lo que existe el riesgo de explosión en caso de calentamiento. Almacenar en un lugar bien ventilado y mantener alejado de materiales combustibles.
- **Hidrógeno.** Gas extremadamente inflamable. Normalmente se almacena a presión, por lo que existe el riesgo de explosión en caso de calentamiento. Almacenar en un lugar bien ventilado y mantener alejado del calor, chispas, llamas abiertas o cualquier otra fuente de ignición.
- **Propilenglicol.** Se trata de un químico relativamente inocuo para la salud y estable en condiciones ambientales. Debe evitarse el calentamiento fuerte y el contacto con oxidantes fuertes, así como su liberación al sistema de alcantarillado y al medio natural. Se recomienda ventilación en las zonas donde se use este producto químico, y, en caso de manipulación, protegerse con gafas de seguridad y guantes de látex o nitrilo.

8.1.1. Sección I. Riesgos en el pretratamiento del aire

A lo largo de toda esta sección se trabaja con materiales relativamente inertes (aire, agua y sólidos estables no combustibles), así que no hay grandes riesgos asociados a materiales. Algunos de los equipos trabajan a presión superior a la atmosférica, por lo que existe el riesgo de que exploten por despresurización súbita en caso de, por ejemplo, roturas o impacto de proyectiles. Sin embargo, se puede considerar que la presión de trabajo (5 bar) es baja en comparación con otros equipos de la planta (el reactor trabaja a más de 200 atm), así que el riesgo de explosión se analizará en otras secciones.

8.1.1.1. *Ruido*

La Sección I cuenta con dos compresores, los cuales son grandes fuentes de ruido y vibraciones. La exposición prolongada a ruidos y vibraciones causan efectos adversos sobre la salud de los trabajadores; los más conocidos y directos son la pérdida de capacidad auditiva, pero también puede producir alteraciones sobre el sueño, enfermedades cardíacas y mentales (estrés, depresión o ansiedad) (Lamigueiro et al.). Por tanto, resulta imprescindible tomar medidas para la reducción del ruido en las instalaciones.

La secuencia más efectiva a la hora de tomar medidas frente a un riesgo son (Storch de Gracia y García Martín 2008):

- 1º) **Actuar sobre la fuente.** No es posible eliminar los compresores de la planta ya que son esenciales para el correcto funcionamiento de la misma, pero se puede buscar modelos que generen poco ruido. Por otro lado, es imprescindible realizar un buen mantenimiento, ya que estos equipos tienden a generar más ruido conforme envejecen.
- 2º) **Actuar sobre el medio.** Para ello es conveniente crear una sala de compresores que posea un buen aislamiento acústico. De tal manera, el ruido solo afectaría al personal que necesite entrar a la sala de compresores para hacer comprobaciones o mantenimiento.
- 3º) **Actuar sobre el trabajador.** En última instancia, para proteger la salud de los trabajadores que deban realizar operaciones en la sala de compresores se les debe proporcionar EPIs adecuados. En este caso, orejeras o cascos anti ruido con una reducción de decibelios adecuada para el nivel de ruido de la sala.

8.1.1.2. *Riesgo térmico por temperaturas elevadas*

Durante la etapa de calentamiento en la desorción se calienta el aire de purga hasta una temperatura de 180 °C, siendo esto un riesgo para los trabajadores ya que se podrían quemar. Por otro lado, trabajar en ambientes muy cálidos produce incomodidad, lo cual predispone a sufrir accidentes con mayor facilidad (Storch de Gracia y García Martín 2008). Siguiendo el orden citado anteriormente, las medidas de prevención de accidentes en este caso son:

- 1º) **Actuación sobre la fuente.** Instalar una capa de material aislante sobre todos los equipos y tuberías que son calentados durante la etapa de desorción es una forma barata y eficaz de reducir el riesgo térmico. Además, el proceso se ve beneficiado, pues se reducen las pérdidas de calor por radiación
- 2º) **Actuación sobre el medio.** Se pueden instalar barreras a una distancia prudencial de los equipos para hacer más difícil el acercamiento de los trabajadores a los equipos.
- 3º) **Actuación sobre el trabajador.** Resulta esencial educar a los trabajadores para que tomen conciencia de los peligros asociados a las instalaciones, y así realicen operaciones más seguras. Además, al igual que en el caso anterior, se les debe proporcionar EPIs adecuadas de protección contra el calor en caso de que deban realizar operaciones a altas temperaturas (lo cual solo debería realizarse en caso de extrema necesidad).

8.1.2. **Sección II. Riesgos de la separación criogénica**

Los mayores riesgos asociados a esta sección son las bajas temperaturas (del orden de -180 °C) y el peligro de explosión ya que hay equipos que trabajan a 40 atm. Por otro lado, cabe mencionar que las válvulas de expansión generan ruido, para lo cual se pueden tomar las medidas explicadas en el punto 1 y 3 de la sección 8.1.1.1.

8.1.2.1. *Riesgo térmico por temperaturas criogénicas*

Los riesgos asociados a las bajas temperaturas en esta sección del proceso llevan asociados múltiples riesgos. El más evidente es el de peligro de congelamiento de los trabajadores, así como quemaduras por frío. Por otro lado, trabajar a temperaturas muy bajas sin la protección adecuada puede causar entumecimiento, aumentando así las probabilidades de sufrir accidentes (Storch de Gracia y García Martín 2008).

Cabe mencionar que la columna trabaja a temperaturas inferiores a 0 °C, por lo que existe el riesgo de que el agua presente de forma natural en el ambiente condense o incluso llegue a cristalizar sobre las superficies, formando capas de hielo y aumentando la probabilidad de sufrir caídas. Por último, pero no menos importante, para construir los equipos se debe seleccionar un acero especial capaz de soportar temperaturas criogénicas sin perder resistencia mecánica.

Las medidas que se deben tomar para reducir este riesgo son:

- 1º) **Actuación sobre la fuente.** El material de construcción de los equipos debe ser adecuado para las condiciones de operación. Se debe hacer una buena inversión para aislar las tuberías y equipos con el objetivo de minimizar las pérdidas de frío en el proceso. Esto permitirá que el mismo sea más eficaz, y permitirá que el ambiente en sus inmediaciones no sea tan frío.
- 2º) **Actuación sobre el medio.** Para mitigar el riesgo tras la formación de capas de hielo resulta conveniente que el suelo tenga una elevada rugosidad en el entorno de los equipos a muy bajas temperaturas. De esta manera, se aumenta la fricción del suelo incluso si hay hielo, reduciendo la probabilidad de caída.
- 3º) **Actuación sobre el trabajador.** Al igual que en el caso anterior, educar a los trabajadores en seguridad es esencial. Además, en caso de que deban hacer algún tipo de operación se les debe proporcionar EPIs adecuados; por ejemplo, ropa térmica y guantes adecuados para trabajar a temperaturas muy bajas.

8.1.2.2. *Riesgo de explosión por elevadas presiones*

El *reboiler* de la columna de alta presión trabaja a 40 atmósferas, ya que intercambia calor con la alimentación fresca que está a dicha presión. Por tanto, existe el riesgo de explosión por despresurización súbita. Las medidas a tomar son las siguientes:

- 1º) **Actuación sobre la fuente.** Se debe prestar especial atención a la etapa de diseño y construcción del equipo, pues de ello dependerá que la operación sea intrínsecamente segura. Además, dado que el material con el que se trabaja es aire y no supone un peligro para el medio ambiente, resulta conveniente instalar válvulas de alivio y discos de ruptura para evitar las sobrepresiones.
- 2º) **Actuación sobre el medio.** En caso de explosión, para evitar consecuencias mayores sobre otras zonas de la planta (proyectiles, explosiones secundarias), resulta conveniente alejar este equipo de otros equipos críticos, o colocar barreras físicas que

minimicen las consecuencias de un posible accidente sobre otras secciones de la planta.

- 3º) **Actuación sobre el trabajador.** Se debe educar a los trabajadores en las actuaciones que deben realizar en caso de explosión. Además, la utilización de casco en toda la planta debe ser obligatoria, para protegerse de posibles proyecciones.

8.1.3. Sección III. Riesgos en la electrólisis del agua

En cuestiones de seguridad, esta sección supone un reto. Por un lado, el hidrógeno es un gas muy explosivo, y su elevada difusión a través de algunos materiales supone que el riesgo de que se produzcan fugas es bastante alto. Por otro lado, los electrolizadores trabajan con voltajes e intensidades de corriente elevados, lo cual supone un riesgo eléctrico para los trabajadores. La conjunción de ambos factores supone que el riesgo por explosión sea muy elevado, lo cual justificaría realizar grandes inversiones en seguridad.

8.1.3.1. Riesgo eléctrico

El riesgo eléctrico se puede manifestar de dos maneras diferentes: electrocución de los trabajadores y chispas que pueden suponer una fuente de ignición para explosiones. Para prevenir ambos peligros, todos los equipos eléctricos deben estar diseñados para trabajar en condiciones ATEX. Además, es imprescindible que haya un buen mantenimiento de los mismos, para evitar el desgaste del material aislante. (Storch de Gracia y García Martín 2008)

Otras formas de reducir el riesgo eléctrico es la instalación de diferenciales y la separación de circuitos eléctricos; es decir, que los mandos de los equipos estén alimentados por un circuito eléctrico auxiliar de baja tensión para proteger al trabajador que maneja los equipos. (Storch de Gracia y García Martín 2008)

Nuevamente resulta imprescindible educar a los trabajadores para que entiendan los peligros asociados a la introducción de dispositivos eléctricos no ATEX. Asimismo, se les debe proporcionar los EPIs adecuados para que puedan realizar operaciones seguras; por ejemplo, guantes, botas y herramientas manuales con aislamiento eléctrico. (Storch de Gracia y García Martín 2008)

8.1.3.2. Riesgo de explosión por fugas de hidrógeno

Para prevenir la fuga de hidrógeno es esencial que el material utilizado para la fabricación de los equipos en contacto con este gas sea adecuado para minimizar las posibles

fugas. Por otro lado, el mantenimiento de las instalaciones debe ser adecuado, ya que cualquier deterioro en las juntas puede producir fugas.

Una manera de eliminar el riesgo de explosión es la inertización total de la sección; eliminando el comburente de la ecuación, no habrá reacción en cadena que genere una explosión. Sin embargo, esto no es asumible, ya que es muy caro y poco práctico para los operarios en planta. Otra forma de reducir el riesgo por explosión es mediante una buena ventilación en esta sección; de esta manera, aunque haya fugas de hidrógeno, el combustible será diluido por el aire y las condiciones de planta estarán fuera de los límites de inflamabilidad (de 18.3 % al 59 %). (Storch de Gracia y García Martín 2008; Lewis y von Elbe 1960)

8.1.4. Sección IV. Riesgos del reactor de síntesis

La sección IV está constituida por varias etapas de compresión y el reactor de síntesis, el cual trabaja a elevada presión y temperatura (200 atm y 400 °C). A los compresores de esta sección se les aplica todo lo explicado en la sección 8.1.1.1. El reactor, al tratarse de un equipo clave para el proceso y que trabaja en condiciones complicadas, se le hará un análisis de riesgo y operabilidad (HAZOP) para identificar sus vulnerabilidades y sugerir medidas preventivas.

8.1.4.1. Gestión del catalizador

El lecho catalítico que constituye el reactor está compuesto por el catalizador comercial KM1R, el cual presenta un tiempo de vida útil de entre 10-15 años. Una vez alcanzado este plazo, el catalizador ha perdido irreversiblemente su actividad catalítica y se debe gestionar como un residuo.

En función de su composición y del posible arrastre de contaminantes, se considera un residuo peligroso bajo el código LER 16 08 02*: *catalizadores usados que contienen metales de transición peligrosos*, conforme a la Orden MAM/304/2002 y la Ley 7/2022, de residuos y suelos contaminados para una economía circular.

El procedimiento para retirar el catalizador del reactor debe ser realizado por personal capacitado en condiciones seguras y con el empleo de equipos de protección individual adecuados (mascarilla con filtro químico, guantes, gafas y cualquier otro equipo necesario).

El almacenamiento temporal de este residuo debe realizarse en una zona autorizada, techada y ventilada, provista de cubetos de retención. Según la normativa vigente (Ley 7/2022), el residuo puede permanecer almacenado un periodo máximo de 6 meses.

Para su traslado, se debe contratar un gestor de residuos peligrosos autorizado. El transporte se realizará en cumplimiento del Real Decreto 553/2020, que regula los traslados de residuos en el interior del territorio español. Es obligatorio elaborar un documento de identificación del residuo (manifiesto de traslado), el cual debe ser firmado por el productor, el transportista y el gestor receptor.

En cuanto a la gestión final del residuo, tiene mayor preferencia la revalorización del residuo. La alternativa más adecuada sería destinar estos residuos a una planta autorizada para la recuperación de hierro y óxidos metálicos. Si esta opción no es viable técnica o económicamente, el destino final será su eliminación en un vertedero para residuos peligrosos.

El gestor final deberá emitir un certificado de tratamiento o eliminación, el cual será archivado por la planta generadora como parte de sus registros de gestión ambiental.

8.1.4.2. *Análisis detallado de riesgo y operabilidad (HAZOP)*

Un estudio HAZOP (por sus siglas en inglés *Hazard and Operability Study*, o *Estudio de Peligros y Operabilidad*) es una método inductivo y sistemático que se utiliza para analizar en detalle un proceso u operación bien definido, ya sea en fase de diseño o en funcionamiento (Crawley y Tyler 2015).

Su objetivo principal es identificar y evaluar peligros potenciales relacionados con la seguridad, la salud o el medio ambiente, así como problemas de operabilidad que puedan surgir debido a desviaciones respecto al diseño previsto o a la intención operativa. Además, el HAZOP permite detectar posibles debilidades en el diseño del proceso, facilitando la implementación de mejoras antes de que ocurran incidentes.

La metodología de un análisis HAZOP requiere lo siguiente:

1. Fijar los objetivos.
2. Definir los equipos de trabajo.
3. Recopilar información básica necesaria.
4. Desarrollo de sesiones.

Cuando se disponga de todos los aspectos mencionados, se podrá comenzar con el procedimiento de análisis, para esto se deben definir los nudos o puntos en los que se pueda producir una variación significativa de alguna variable del proceso (presión temperatura, composición, caudal, nivel, etc). A continuación, luego de identificar los nudos en el diagrama correspondiente, se procede a aplicar de forma sistemática las palabras guía a las variables

relevantes. En la Tabla XXX se muestran las palabras guía fundamentales y su significado (Crawley y Tyler 2015).

Tabla XXX. Palabras guía fundamentales y su significado.

Palabra guía	Significado
NO	Negación o ausencia de las especificaciones de diseño
MÁS/MENOS	Aumento o disminución cuantitativa
MAYOR QUE o ASÍ COMO	Aumento cualitativo
PARTE DE	Disminución cualitativa
INVERSO	Oposición a la función deseada
DE OTRA FORMA	Sustitución de la función deseada

Para el proceso, se ha fijado como objetivo la identificación de todas las posibles alteraciones peligrosas, en torno al reactor de síntesis, que se ha definido como nodo de análisis, por presentar un mayor riesgo con respecto a otros equipos, debido a sus condiciones de operación (400 °C y 200 atm). Dado que las variables de operación del reactor dependen tanto de los sistemas de precalentamiento de la alimentación, como de los de refrigeración intermedia, así como de las válvulas que regulan corrientes de entrada y salida, estos equipos han sido considerados también dentro del estudio HAZOP abordado. En base a esto, el nodo del proceso seleccionado se muestra en la Figura 22.

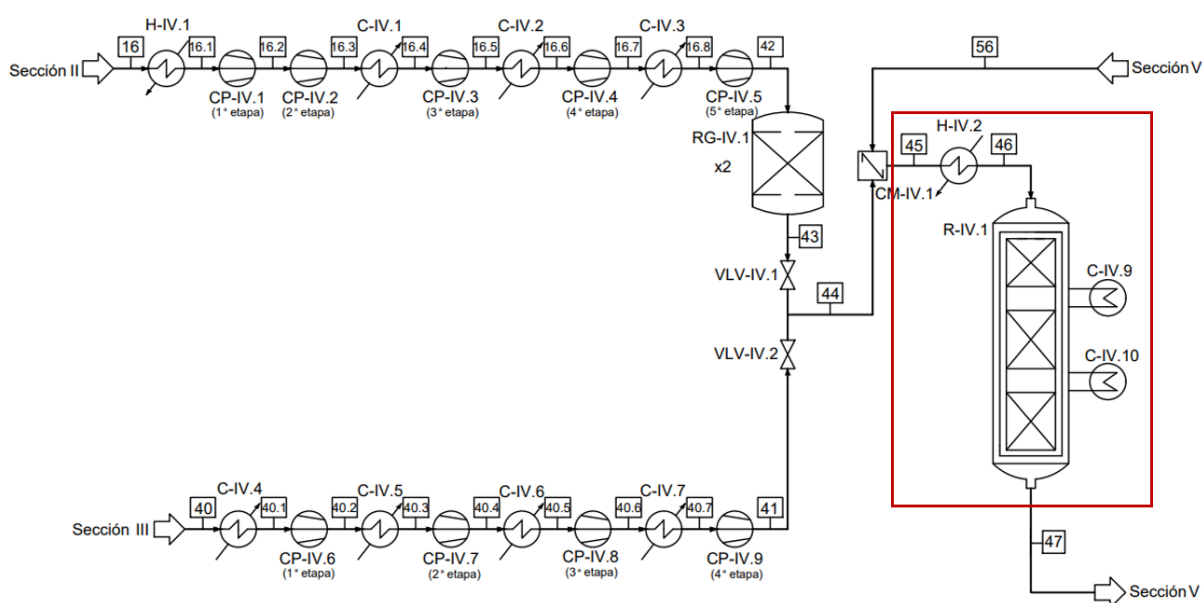


Fig. 22. Nodo al que se realiza el análisis HAZOP.

A continuación, la Tabla XXXI-XXXV muestran el análisis realizado.

Tabla XXXI. Análisis HAZOP al reactor. Palabra guía: NO.

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acciones a tomar
NO	No flujo	Fallo en el sistema de impulsión de fluidos. Válvulas de control cerradas.	No se disipa el calor generado residual del último ciclo. Aumenta la temperatura en los lechos.	Instalación de sistema para detección y control de flujo. Incluir sistema de parada de emergencia, con sistema de refrigeración adicional en caso de emergencia.
	No refrigeración	Fallo en el sistema de refrigeración intermedio	Sobrecalentamiento del lecho. Degradación del catalizador. Reacción fuera de control.	Instalar sistema de medida y control de temperatura. Instalar sistema de regulación para el flujo de agua en el sistema de refrigeración. Inspección regular y mantenimiento del sistema de refrigeración.
	No purga	Fallo en el lazo de control automático de purga. Sensor de composición defectuoso que no detecta acumulación de inertes	Acumulación progresiva de inertes. Caída en la eficiencia de conversión. Aumento de presión en el sistema.	Instalar sistema de monitoreo continuo de inertes. Alarma de alta concentración de inertes. Procedimiento de verificación diaria de la purga.
	No recirculación	Falla del compresor de recirculación. Bloqueo en tuberías. Válvulas cerradas	Reducción de eficiencia y aumento de costos operativos	Instalar sistema de medida y control en la conducción de la recirculación. Alarma de bajo caudal de recirculación.

Tabla XXXII. Análisis HAZOP al reactor: Palabra guía: MÁS.

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acciones a tomar
MÁS	Más flujo de alimentación	Fallo en las válvulas para la mezcla de reactivos	Aumento de temperatura. Formación de puntos calientes. Riesgo de sobrepresión. Aumento en la caída de presión. Problemas para la transmisión de calor en sistemas de refrigeración intermedia.	Instalar sistema de medida y control de flujo previo al punto de mezcla. Inspección regular de la conducción (rondas periódicas)
	Más temperatura	Fallo en el sistema de refrigeración entre etapas de reacción	Pérdida de control térmico en el segundo y tercer lecho. Reacción inversa favorecida en zona caliente. Sinterización del catalizador y disminución de su vida útil.	Instalación de sistemas de medida y control de temperatura. Instalar alarmas en caso de aumento excesivo en la temperatura. Incluir sistema de refrigeración en caso de emergencia.
	Más presión	Obstrucción aguas abajo en una conducción aguas abajo	Posible pérdida de contención. Daño en separador de amoníaco, compresores y cambiadores por sobrepresión	Instalación de sistemas de medida y control de presión. Instalar alarmas en caso de aumento excesivo en la presión. Inspección y mantenimiento de las conducciones

Tabla XXXIII. Análisis HAZOP al reactor: Palabra guía: MENOS.

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acciones a tomar
MENOS	Menos flujo	Fallo de válvula, cierre manual accidental	Baja conversión. Enfriamiento excesivo. Posibles fluctuaciones térmicas	Instalar sistema de medida y control de flujo. Inspección regular de la conducción (rondas periódicas)
	Menos temperatura	Fallo en sistema de calentamiento de la corriente de entrada al reactor. Exceso de refrigeración	Disminución en la velocidad de reacción. Disminución de la conversión. Favorecimiento de la reacción inversa. Condiciones fuera del diseño térmico	Instalar sistemas de alarmas de baja temperatura por lecho. Incluir Indicadores de temperatura en la entrada y salida de cada lecho. Instalar control automático de válvulas de refrigeración intermedia. Instalar control automático de válvulas de refrigeración intermedia
	Menos presión	Fuga. Apertura de válvula de alivio. Fallo de compresor	Disminución en la conversión. Problemas en la etapa de separación	Instalación de sistemas de medida y control de presión. Instalar alarmas en caso de disminución de la presión por debajo de niveles normales. Inspección y mantenimiento de las conducciones

Tabla XXXIV. Análisis HAZOP al reactor. Palabra guía: MAYOR QUE / PARTE DE.

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acciones a tomar
MAYOR QUE	Mayor temperatura que en los niveles normales de operación	Falla en el sistema de refrigeración intermedia.	Sinterización del catalizador. Daño térmico. Disminución de conversión.	Instalación de sistemas de medida y control de temperatura. Instalar alarmas en caso de aumento excesivo en la temperatura. Incluir sistema de refrigeración en caso de emergencia.
	Mayor concentración de oxígeno que la permitida	Déficit en el sistema de reducción de la concentración de oxígeno.	Disminución de la eficacia de reacción. Envenenamiento del catalizador.	Instalar sistema de monitorio de la concentración de oxígeno que entra en el interior del reactor. Regenerar periódicamente los lechos de cobre para mantener su eficacia
PARTE DE	Presencia de contaminantes para el catalizador	Ineficiencia en los sistemas de pretratamiento	Disminución de la actividad catalítica. Disminución en la conversión, lo que afecta a la producción general	Instalar sistemas de medida de contaminantes a la entrada del reactor. Incluir alarmas para detectar niveles de contaminantes en la alimentación al reactor fuera de las especificaciones del catalizador.

Tabla XXXV. Análisis HAZOP al reactor. Palabra guía: DE OTRA FORMA

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acciones a tomar
DE OTRA FORMA	Puesta en marcha	Error humano, fallo de procedimiento.	Golpes de calor o presión, daño a equipo o catalizador.	Establecer protocolos sobre el procedimiento de arranque. Impartir una correcta formación a los trabajadores.
	Composición distinta	Relación H_2/N_2 fuera de especificación.	Conversión ineficiente. Acumulación de inertes. Bajo rendimiento.	Instalar medidor y controlador flujo para asegurar que la relación entre reactivos adecuada.

8.1.5. Sección V. Riesgos en la etapa de separación y purificación

En esta sección algunos equipos trabajan a presión de hasta 200 atm, por lo que hay riesgo de explosión por despresurización. El objetivo de esta sección es la separación del amoníaco de la mezcla reaccionante mediante una serie de condensaciones; el amoníaco en condiciones atmosféricas es un gas, por lo que si equipos como los separadores gas-líquido sufren despresurizaciones súbitas existe la posibilidad de que se produzcan explosiones tipo BLEVE.

Este peligro se incrementa considerando que el segundo de los condensadores de amoníaco (el que trabaja a -33 °C) utiliza como refrigerante un líquido inflamable, por lo que en caso de ruptura del equipo se podrían ocasionar incendios. Por otro lado, la presencia de gases combustibles como el hidrógeno o el amoníaco suponen que en caso de explosión se podrían formar bolas de fuego, agravando más todavía las consecuencias de un posible accidente.

8.1.5.1. Riesgo asociado a explosiones

La prevención de explosiones en esta sección es de vital importancia ya que, tal y como se ha explicado anteriormente, una explosión podría desencadenar un efecto dominó con consecuencias terribles para la planta, el entorno y los trabajadores. Para prevenir las explosiones, lo primero es un buen sistema de control de las instalaciones, instalando duplicados para los sensores de presión y temperatura.

Para la prevención de explosiones por sobrepresión, se recomienda que todos los equipos presurizados posean válvulas de alivio que desemboquen en un quemador o antorcha, para que las posibles sustancias inflamables no sean liberadas al medio de forma directa.

Por otro lado, resulta recomendable incluir cubetos de derrames entorno a los equipos que portan líquidos, además de sistemas automáticos de detección o extinción de fuegos. De esta manera, si se producen fugas estas serán recogidas por los cubetos, y si se produjera la ignición del líquido, los sistemas de detección y extinción automáticos apagarían las llamas antes de que estas pudieran causar daños a equipos cercanos.

8.2. ANÁLISIS DE IMPACTO AMBIENTAL

Toda actividad humana, industrial o no, produce un impacto, positivo o negativo, sobre el entorno donde se realizan. En particular, las actividades industriales tienen un impacto sobre el entorno muy elevado, y por ello han de estar reguladas por ley; en España todas las actividades relacionadas con la industria química están sujetas a la Ley 21/2013 de Evaluación de Impacto Ambiental (Gobierno de España 2013).

Esta ley busca la protección del medio ambiente, facilitando “la incorporación de criterios de sostenibilidad [...] a través de la evaluación de planes y programas”. De esta manera se “garantiza una adecuada prevención de los impactos ambientales concretos que se puedan generar, al tiempo que se establece mecanismos eficaces de corrección o compensación”. (Gobierno de España 2013)

Una evaluación de Impacto Ambiental completa exige un estudio riguroso y exhaustivo de las características del entorno en que se realizará la actividad industrial con el objetivo de identificar las vulnerabilidades y los efectos de dicha actividad, y establecer mecanismos de prevención y protección al entorno. Se procederá a realizar un análisis simplificado de los aspectos que se consideran más significativos:

- Flora, fauna y biodiversidad
- Tierra, suelo, subsuelo y geodiversidad
- El aire y el clima
- El agua y el medio marino
- El paisaje, población y salud humana

8.2.1. Flora, fauna y biodiversidad

El polígono industrial Zalia es, actualmente, un conjunto de parcelas vacías habilitadas como zona industrial a la espera de ser ocupadas por industrias. Las parcelas, al llevar bastante tiempo desocupadas, están cubiertas por vegetación local de baja altura, esencialmente plantas herbáceas y algunos arbustos. Es de esperarse que, como parte de la fauna en esta zona se incluyan insectos y roedores de pequeño tamaño, aunque no hay estudios que avalen esta hipótesis.

Las operaciones de desbroce y la instalación de la planta de producción de amoníaco supondrían una clara destrucción de estos ecosistemas. Sin embargo, cabe mencionar que este es un entorno ya urbanizado; las actividades de construcción de carreteras y servicio ya

han alterado significativamente el entorno, destruyendo la biodiversidad natural de esa zona. Por tanto, se puede considerar que el impacto adicional sobre la flora, la fauna y la biodiversidad de la instalación de una planta de producción de amoníaco verde en un polígono industrial no es especialmente significativo.

A través de una serie de medidas se puede fomentar la biodiversidad y hacer el proyecto más sostenible; para ello es recomendable incluir espacios verdes en las porciones de terreno vacías o no explotadas en las que plantar vegetación autóctona (arbustos, árboles, flores...), lo cual, a su vez, atraerá a la fauna local.

8.2.2. Tierra, suelo, subsuelo y geodiversidad

El polígono industrial de Zalia es un terreno completamente llano, ya que es lo más conveniente para la instalación de industrias y naves de almacenamiento. Por tanto, *a priori* se puede considerar que la geodiversidad del terreno es escasa. Sería necesario hacer estudios concretos sobre la composición del terreno para constatar esta hipótesis. Por otro lado, también se desconocen las características del subsuelo de la zona, por lo que no se pueden estimar los efectos sobre el mismo.

Para la instalación de una planta de producción de amoníaco verde es necesaria la construcción de cimientos de gran envergadura, por lo que aún sin considerar los posibles efectos sobre el subsuelo es de esperarse que el impacto ambiental sobre el terreno sea muy elevado.

8.2.3. El aire y el clima

Para la extracción de nitrógeno del aire es necesario utilizar gran cantidad de aire que se extraerá de la atmósfera. Sin embargo, se puede considerar al aire como una materia prima inagotable, así que el impacto ambiental de la explotación del aire será nulo. Por otro lado, cabe mencionar que ocasionalmente se pueden realizar venteos de corrientes de aire a muy altas o bajas temperaturas, lo cual puede suponer contaminación térmica en la atmósfera. Por tanto, en su conjunto se puede considerar que el impacto sobre el aire de esta actividad industrial es moderado.

En cuanto al clima, una planta de producción de amoníaco clásica tendría un impacto muy elevado, ya que emitiría grandes cantidades de dióxido de carbono a la atmósfera. De manera comparativa, a esta planta de producción de amoníaco se le asignará un impacto sobre el clima moderado. La disminución en el nivel de gravedad de impacto sobre el clima

se debe a que la producción de hidrógeno se obtiene de la electrólisis, por lo que se reduciría significativamente la emisión de gases de efecto invernadero (siempre y cuando la electricidad proceda de fuentes renovables).

8.2.4. El agua y el medio marino

El polígono industrial de Zalia se encuentra a más de 6 km del mar, por lo que se espera que el impacto de esta actividad industrial sobre el medio marino sea nulo. Por otro lado, cabe mencionar que, en las inmediaciones del polígono industrial se localiza el embalse de San Andrés de los Tacones, el cual está clasificado dentro de la Red Natura 2000 como Zona Especial de Protección de Aves (ZEPA). En la Figura 23 se muestra un plano de la región donde se indica la zona protegida.

La Red Natura es una red ecológica europea de áreas de conservación de la biodiversidad, cuya finalidad es asegurar la supervivencia a largo plazo de las especies y los tipos de hábitat en Europa, contribuyendo a detener la pérdida de biodiversidad. (MITECO 2025).

Por tanto, como medidas de prevención a la contaminación, resulta imprescindible tratar todas las corrientes de agua del proceso (aunque se considere que están limpias) para evitar la contaminación del entorno natural protegido. Una forma de hacer esto sin incurrir en grandes inversiones es ceder las corrientes de agua a un gestor autorizado para que las trate antes de ser liberadas al entorno natural.



Fig. 23. Cartografía de la Red Natura 2000 en las inmediaciones del polígono industrial Zalia. Rodeado con línea semicontinua el polígono Zalia. ZEPA es “Zona de Especial Protección para Aves”. ZEC es “Zona Especial de Conservación”. LIC es “Lugares de Importancia Comunitaria”.

8.2.5. El paisaje, población y salud humana

Las actividades industriales clásicas tienen un impacto paisajístico muy negativo, debido a que la mayoría de las estructuras no son estéticamente agradables. Esto perjudica la imagen de la empresa porque, aunque las políticas medioambientales y sociales sean buenas, si la industria tiene un “mal aspecto” la población local percibirá la actividad como nociva para el entorno y/o la salud de las personas.

Aprovechando las características “verdes” del proyecto, merece la pena invertir en la ordenación paisajista de la parcela; así, además de mejorar la percepción social de la actividad industrial, se fomenta la integración ecológica de la actividad industrial y el entorno por la plantación de especies vegetales locales.

En cuanto al impacto sobre la salud humana, el amoníaco es un gas tóxico e irritante con un olor muy desagradable. Si se producen fugas o vertidos de esta sustancia al medio las consecuencias podrían ser muy negativas, ya que la planta se localiza a escasos 3 km de la ciudad de Gijón. Por tanto, hay que cuidar que no se produzcan fugas de productos al medio. Por otro lado, se recomienda que los operarios de la planta que trabajen en la sección de síntesis y purificación del amoníaco utilicen mascarillas aptas para gases a modo de prevención en caso de fugas.

Si se toman las medidas de seguridad descritas en este documento, esta actividad industrial debería poder realizarse con total seguridad y con un impacto mínimo sobre el medio. Considerando que esta actividad industrial generará muchos puestos de trabajo (40 operarios de planta, calculados en la sección 9.3.5, pero hay que sumar también al personal encargado del transporte y la gestión, entre otros). Por tanto, se puede considerar que esta actividad tendrá un impacto positivo sobre la población de la región.

9. EVALUACIÓN ECONÓMICA

9.1. COSTE DE EQUIPOS

En cada una de las secciones se ha detallado la forma de obtener los costes de los diferentes equipos y con ello, el cómputo global. En la Tabla XXXVI, se muestra la recapitulación de los costes de los equipos por secciones, actualizados al año 2025.

Tabla XXXVI. Costes de los equipos de las cinco secciones y suma total (año 2025).

EQUIPOS	Coste (M€, 2025)
Sección I	1.339
Sección II	2.417
Sección III	45.205
Sección IV	6.33
Sección V	4.378
Total (sin transporte)	59.669
Transporte	5.966
TOTAL	64.17

9.2. INVERSIÓN DE CAPITAL

Los costes anteriores se refieren a costes de fabricación, sin embargo, la instalación de equipos en planta, este comienza a generar una serie de costes directos, que incluyen, conexión a la red eléctrica y de tuberías, el terreno donde se sitúa, los sistemas de control, etc. Por otro lado, existe una serie de costes asociados a la puesta en marcha en sí de la planta. Estos se denominan costes indirectos, ya que, se refieren en mayor medida a asuntos burocráticos, tales como ciertos gastos legales, la supervisión y auditorías, así como un remanente que es obligatorio tener por ley, para hacer frente a contingencias.

Además, se debe tener en cuenta el capital circulante (working capital, WC), que es aquella cantidad mínima necesaria para iniciar la operación de la planta.

El coste asociado a cada uno de estos grupos se calcula teniendo en cuenta un % que se establece en función del tipo de planta, en este caso, una planta de tipo fluido-fluido, y que

aparecen recogidos en la Tabla B.XII. (Peters et al. 2004). Se calculan todos estos costes, cuyos resultados se pueden ver en la Tabla XXXVII.

Tabla XXXVII. Inversión de capital para la operación de la planta.

Costes	Valor (M€)
<i>COSTES DIRECTOS</i>	
Equipos entregados (Sección I-V)	64.17
Instalación de equipos	30.16
Instalación de sistemas de control	23.10
Conexión a red de tuberías	43.64
Sistemas eléctricos	7.06
Edificios y servicios	11.55
Mejoras en el terreno	6.42
Instalaciones de servicios	44.92
TOTAL COSTES DIRECTOS	231.01
<i>COSTES INDIRECTOS</i>	
Ingeniería y supervisión	21.18
Construcción	26.31
Gastos legales	2.57
Contratistas	14.12
Contingencias	28.23
TOTAL COSTES INDIRECTOS	92.40
INVERSIÓN DE CAPITAL FIJO (FCI)	323.41
CAPITAL CIRCULANTE (WC)	51.88
INVERSIÓN DE CAPITAL TOTAL (TCI)	375.30

9.3. COSTES DE OPERACIÓN

Tras la inversión inicial, se comienzan a generar una serie de costes derivados de la propia actividad de la planta, desde materias primas, hasta servicios de refrigeración o calefacción.

9.3.1. Materias primas

El aire es una de las materias primas, necesario en el proceso para la obtención de nitrógeno, por tanto, esto reduce mucho los gastos de materias primas ya que no es un bien abonable.

La otra materia prima fundamental es el agua, de la que, concretamente, se requieren 148 807 kg/h. Considerando una densidad de 997 kg/m³ (a temperatura de entrada 15 °C), esto equivale a 149.25 m³/h. En la Tabla B.XIII, aparece el coste del agua por unidad de volumen. En este caso, dado que se va a emplear agua de red tanto para producir hidrógeno, como para refrigerar distintas partes del proceso, se decide calcular el coste buscando el precio del m³ de agua en España, que tiene un valor de 1.92 €. Se supone que la planta va a trabajar 24 horas al día, durante 330 días al año. («Datos de contacto de Ayuntamiento de Gijón» 2025).

9.3.2. Sustitución de los lechos de adsorción y de catalizador

En distintas secciones del proceso, se requiere utilizar lechos de adsorción con el fin de eliminar algún componente de las diferentes corrientes. Estos lechos tienen una vida útil, tras la cual es necesario sustituirlos para continuar con la operación de la planta. Lo mismo ocurre con el catalizador de la sección de reacción, que se envenena o inertiza con el tiempo. Esto conlleva una serie de costes mostrados en la Tabla XXXVIII.

Tabla XXXVIII. Coste de sustitución de los lechos de adsorción y de catalizador.

Lechos	Coste (€/año)
Sección I	6 496
Sección III	2 896
Sección IV	25 591
TOTAL	34 984.65

9.3.3. Requerimientos de servicios

En todas las secciones se necesita algún servicio de calefacción y/o refrigeración, así como, por supuesto, electricidad en toda la planta. En la Tabla B-XIII se muestran los costes de algunos de estos servicios. Sin embargo, para los que no se encuentran en dicha Tabla, se buscan en la bibliografía, como el Therminol («Precios de Fluidos para transferencia de calor Therminol» 2025) y el propilenglicol en agua («AF GLYCOL HRP-60 Anticongelante Concentrado para Circuitos Cerrados de Agua con Propileno - Protección y Eficiencia | Bricoprofe» 2025) y en la Tabla B.XVI. se muestran los resultados de costes para cada una de las corrientes. Esta se puede ver de manera resumida en la Tabla XXXIX.

Tabla XXXIX. Cálculo de los costes de servicios.

Servicio	TOTAL	Precio	Coste (€,2025)
NH ₃ (7% pérdidas) (kg/año)	4 109.6	0.81 \$/kg	2 896
Vapor vivo (kg/año)	40.88·10 ⁶	8.55 \$/t	61.28·10 ⁴
Electricidad (kWh/año)	1 18·10 ⁹	0.064 \$/kWh	7.5·10 ⁷
Agua de refrigeración (m ³ /año)	3.55·10 ⁶	1.92·10 ⁻³ €/kg	6812.47
Dynalene (kg/año)	3 811.5	26 417 \$/m ³	4.59·10 ⁴
Therminol 68 (m ³ /año)	8.87	42.5 \$/m ³	328.13
Propilenglicol en agua al 60%(m ³ /año)	5.80	10 7000 €/m ³	6.2·10 ⁴
TOTAL (M€)	-	-	75.93

Para el cálculo de los fluidos térmicos, se considera que estos fluyen en un circuito cerrado, es decir, se reutilizan continuamente. Dado que no se conoce la cantidad de fluido térmico que puede haber en este sistema cerrado, se estima que tiene capacidad para cubrir los requerimientos energéticos durante 15 minutos y se considera que, a lo largo del año de operación, se va a producir un 7% de pérdidas por diversos motivos, como, por ejemplo, fugas. (Merz et al. 2005)

9.3.4. Otros costes

El ejercicio de la actividad de la planta implica cumplir con una serie de costes adicionales, que aparecen reflejados en la Tabla XL y que, resultan de aplicar un porcentaje sobre el FCI, calculado anteriormente.

Tabla XL. Resumen de otros costes del proceso.

Tipo de coste	Coste (\$,2002)	Coste (\$,2025)	Coste (€,2025)
Mantenimiento	22.56	45.47	39.56
Suministro	48.35	97.43	84.76
Laboratorio	48.35	97.43	84.76
Tasas	6.45	13.00	11.30
Seguros	3.22	6.50	5.65
TOTAL	128.93	259.81	226.04

9.3.5. Costes de mano de obra

A continuación, se calculan los costes de la mano de obra. Se considera que la planta opera 330 días al año, siendo los 35 restantes destinados a labores de mantenimiento o reparación que impliquen la parada de la planta. Habrá cuatro turnos, tres de ellos, deberán trabajar, mientras que el cuarto descansa. Cada uno será de ocho horas de duración. Los costes de la mano de obra en España son de 20.1 €/h (INE 2025). En la Tabla XLI, se muestra la cantidad de trabajadores necesarios teniendo en cuenta el número de equipos y un factor asociado a cada uno de ellos extraído de la Tabla B.XIV. En la bibliografía no se encuentran datos suficientes para calcular la cantidad de trabajadores necesarios en la zona de la electrólisis o en ciertos equipos concretos. Por tanto, se asume un factor igual que para los cambiadores de calor, 0.1 (Peters et al. 2004).

Tabla XLI. Coste de la mano de obra.

Equipo	Nº equipos	Trabajadores
Compresores, expansores	24	2.0
Filtro	18	1.5
Cambiadores de calor	30	3.0
Tanques, columnas	11	3.0
Reactor continuo	1	0.5
Electrolisis	125	2.0
TOTAL	209	12
TOTAL SALARIOS		4.3·10⁵
TOTAL COSTE OPERARIOS		6.44·10⁵

9.4. BALANCE ECONÓMICO

Se calcula el valor actual neto (VAN), el cual permite evaluar si realmente la inversión realizada resulta rentable con el tiempo, mediante la Ecuación 26:

$$VAN = -A + \sum_{t=1}^n \frac{FC_t}{(1+i)^t} \quad [166]$$

Siendo:

A: inversión inicial (FCI)

FC_t: flujo de caja en el año 't'

i: tipo de descuento (0.1%)

n: número de años sobre los que se calcula la inversión

El flujo de caja se calcula como la diferencia entre los ingresos por ventas calculados en el apartado 3.2.2. y los costes de operación calculados en el apartado 9.3, que en total suman 77.4 M€ anuales. Cuando se trata de cifras tan grandes, merece la pena considerar la variación anual en el flujo de caja debido a la inflación. El Banco Central Europeo establece que una economía sana debería tener entorno al 2% de inflación anual (Banco Central Europeo 1992), así que se estimará el FC en los años subsiguientes en base a dicho valor. Por otro lado, se va a escoger un 1% como tipo de descuento, al ser el más habitual. En las Tablas B.XV y B.XVI del Apéndice B se muestran los números calculado para la representación del VAN en la Figura 24.

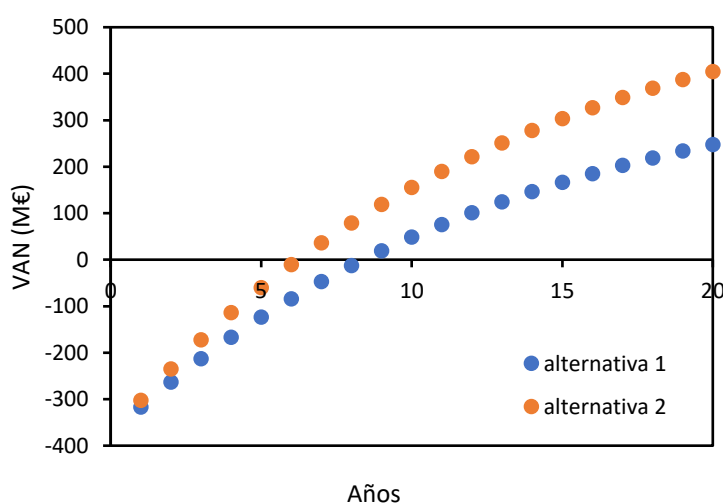


Fig. 24. VAN del proceso a 20 años vista

Se observa que ambas alternativas proporcionan buenos resultados, ya que permiten la amortización del proceso en menos de 10 años; la alternativa 1 permite la amortización en 9 años y la alternativa 2 en 7, por lo que el proceso es rentable

10. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha estudiado la viabilidad económica de una planta de fabricación de amoniaco verde de algo más de 116 000 toneladas anuales de capacidad, como alternativa a las plantas tradicionales que usan metano como materia prima para la obtención de hidrógeno.

Las materias primas han sido aire atmosférico, para obtener nitrógeno, y agua de red, para obtener hidrógeno; por tanto, se ha optado por localizar la planta en el polígono industrial de Zalia, Asturias. Pese a que la disponibilidad de energías renovables es más amplia en otras zonas de España, el elevado consumo de agua de la planta hace que sea prioritario escoger una región con amplia disponibilidad de la misma; si la disponibilidad de agua de red no es suficiente se podría poner en peligro el abastecimiento de agua potable a la población local.

El aire atmosférico se puede considerar como un recurso inagotable, cuya explotación no tiene precio. Sin embargo, debido a la heterogeneidad del mismo, ha sido necesario dedicar una sección completa a su tratamiento previa destilación criogénica. Ambas secciones (Sección I y Sección II) tienen un coste de inversión de 3.74 M€.

Por otra parte, el agua de red está libre de contaminantes, aunque su pureza no es absoluta; por tanto, el tratamiento que hay que hacer de la misma en planta antes de la electrólisis conlleva menos etapas y equipos que el pretratamiento del aire. Cabe mencionar que esta es la sección de mayor coste de la planta (Sección III), con una inversión de capital de 45.2 M€, que supone el 76.4% de la inversión de capital, y costes eléctricos de 72.6 M€, lo cual supone más del 90% de los gastos totales de operación.

La Sección IV y la Sección V tienen como función la producción de amoniaco *per se*; ambas están estrechamente relacionadas y se pueden considerar el corazón del proyecto. En conjunto suponen una inversión de capital de 10.3 M€ y un coste de operación de 2.7 M€/año. La producción final de amoníaco se estima en 116 038 t/año de amoníaco, cuyo precio de mercado ronda los 740 \$/t.

Además de amoníaco, se produce oxígeno como subproducto. La Sección II y la Sección III producen dos corrientes de distintas purezas, siendo el oxígeno procedente de la electrólisis más puro, y por tanto más valioso. Tiene la gran desventaja de tener un porcentaje muy elevado de humedad, pero esta sería fácilmente eliminable gracias a una torre de adsorción con zeolitas, similar a la usada para la purificación de la corriente de hidrógeno.

Al hacer la evaluación económica final se determina que el proyecto presenta una viabilidad económica bastante buena, con un periodo de amortización estimado de entre 7 y 9 años, pese al elevado consumo eléctrico. Además de lo mencionado, hay que considerar algunos aspectos que podrían incluso mejorar las perspectivas futuras de este proyecto:

1. **Avances tecnológicos.** Si mejora la eficacia de las celdas electrolíticas, se necesitará menos electricidad para producir la misma cantidad de hidrógeno, por lo que los costes eléctricos se reducirían.
2. **Financiación estatal.** Este es un proyecto que encaja dentro de las líneas de acción establecidas por el MITECO para la transición ecológica mediante el desarrollo del hidrógeno verde. Si este proyecto contase con apoyo estatal el balance económico puede resultar incluso más positivo.
3. **Situación de mercado.** Los cálculos de ingresos han sido realizados de manera conservadora; si se realizan estudios más exhaustivos es probable que se le pueda asignar un precio de venta mayor a los productos de la planta, aumentando así los ingresos.
4. **Eliminación de las secciones I y II.** Además de la inversión económica inicial por la compra e instalación de equipos, estas dos secciones tienen asociado un coste de operación debido a equipos de impulsión de fluidos, servicios auxiliares y personal, entre otros. Es necesario valorar si resulta más económico comprar nitrógeno a un proveedor de gases industriales o mantener estas dos secciones en el diseño.
5. **Instalación de sistemas de autoabastecimiento eléctrico con energías renovables.** Estos permitirían reducir parcialmente el precio de la factura de la electricidad, aunque su adquisición también supone un coste. Es necesario hacer un balance económico y valorar nuevamente cuál de las dos alternativas resulta más económica.

En definitiva, este es un proyecto innovador con buenas perspectivas de futuro. Diseñado pensando en la seguridad y el medio ambiente, no solo se pretende aportar un granito de arena a la transición ecológica, sino también fomentar el desarrollo económico de la región. Resulta evidente que este trabajo se trata de una primera aproximación, y que se han dejado muchas cosas en el aire, pero merece la pena seguir realizando estudios para que algún día sea posible construir la primera planta de producción de amoníaco verde en España.

11. BIBLIOGRAFÍA

A Fuel Standard for Ammonia: panel wrap-up from the Ammonia Energy Conference 2020. Ammonia Energy Association [en línea], 2020. [consulta: 21 febrero 2025]. Disponible en: <https://ammoniaenergy.org/articles/a-fuel-standard-for-ammonia-panel-wrap-up-from-the-ammonia-energy-conference-2020/>.

ACE Terminal. ACE Terminal [en línea]. [consulta: 29 mayo 2025]. Disponible en: <https://www.aceterminal.nl/en/>.

AGENCIA ESTATAL DE METEOROLOGÍA, 2024. Informe sobre el estado del clima de España 2023. S.I.: Agencia Estatal de Meteorología.

AGÜERO GUILLÉN, J.A., 2017. Producción de amoníaco. S.I.: s.n.

AHN, H. y LEE, C.-H., 2004. Effects of capillary condensation on adsorption and thermal desorption dynamics of water in zeolite 13X and layered beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 59, no. 13, pp. 2727-2743. ISSN 00092509. DOI 10.1016/j.ces.2004.04.011.

ALIBABA, 2025. Astm A283 Gr C A387 A36 Q235 Q345 Ss400 2mm 4mm High Precision Ms Mild Low Alloy Iron Cold Rolled Carbon Steel Sheet Plate - Buy Carbon Steel Sheet,Cold Rolled Carbon Steel Sheet,Black Carbon Steel Sheet Product on Alibaba.com. www.alibaba.com [en línea]. [consulta: 23 junio 2025]. Disponible en: https://www.alibaba.com/product-detail/ASTM-A283-Gr-C-A387-A36_1600668064538.html.

ALIBABA. Hoja De Acero Al Carbono 285,Placa De Acero Al Carbono 285 - Buy A285 Grade C Plate astm Grade A285 C Carbon Steel Sa285 Grade A Astm A285 Gr.c Carbon Steel Plate a285 Grade C And A516 Grade 70 Astm A285 C Carbon Steel Boiler Plate Product on Alibaba.com. www.alibaba.com [en línea]. [consulta: 19 mayo 2025]. Disponible en: https://www.alibaba.com/product-detail/ASTM-A285-Grade-C-Materi-SA285_1600856988391.html.

ALQALLAF, J., ALI, N., TEIXEIRA, J.A. y ADDALI, A., 2020. Solid Particle Erosion Behaviour and Protective Coatings for Gas Turbine Compressor Blades—A Review. *Processes*, vol. 8, no. 8, pp. 984. ISSN 2227-9717. DOI 10.3390/pr8080984.

ALVARADO, L. y CHEN, A., 2014. Electrodeionization: Principles, Strategies and Applications. *Electrochimica Acta*, vol. 132, pp. 583-597. ISSN 00134686. DOI 10.1016/j.electacta.2014.03.165.

Ammonia - Thermophysical Properties. [en línea]. [consulta: 7 julio 2025]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/ammonia-d_1413.html.

Ammonia price index - businessanalytiq. [en línea], 2025. [consulta: 19 marzo 2025]. Disponible en: <https://businessanalytiq.com/procurementanalytics/index/ammonia-price-index/>.

Amoniaco Anhidro 82%. Agrar Fertilizantes [en línea], 2025. [consulta: 26 mayo 2025]. Disponible en: <https://agrarfertilizantes.es/amoniaco-anhidro-82/>.

Amoníaco NH₃ | Air Liquide España - Gases industriales. [en línea], 2024. [consulta: 23 febrero 2025]. Disponible en: <https://es.airliquide.com/gases/amoniaco-nh3>.

Amoníaco verde. Iberdrola [en línea], 2025. [consulta: 1 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.iberdrola.com/conocenos/nuestra-actividad/hidrogeno-verde/amoniaco-verde>.

ANASTAS, P. y EGHBALI, N., 2010. Green Chemistry: Principles and Practice. Chemical Society Reviews, vol. 39, no. 1, pp. 301-312. DOI 10.1039/B918763B.

ARAGÓN, E.D., 2023. En marcha la AEAR, Asociación Española del Amoníaco Renovable. Hidrogeno verde [en línea]. [consulta: 4 marzo 2025]. Disponible en: <https://hidrogeno-verde.es/nace-asociacion-espanola-amoniaco-renovable-aear/>.

Asme BPVC 2021 Section VIII Div. 1. xdocs.net [en línea], 2021. [consulta: 15 junio 2025]. Disponible en: <https://xdocs.net/>.

Aspen Hysys, 2025. 2025. S.I.: AspenTech.

AspenHysis Analyzer, 2019. 2019. S.I.: s.n.

ASTM A387 Alloy Steel, grade 12, Chromium Molybdenum. [en línea]. [consulta: 5 julio 2025]. Disponible en: https://www.matweb.com/search/datasheet.aspx?matguid=d627882828c0442bb9b348825a61ce1b&utm_source=chatgpt.com&ckck=1.

ATLAS COPCO. How to size compressed air piping? - Atlas Copco UAE. [en línea]. [consulta: 5 julio 2025]. Disponible en: <https://www.atlascopco.com/en-ae/compressors/air-compressor-blog/size-compressed-air-piping>.

ATLAS, W. Yearly & Monthly weather - Gijón, Spain. Weather Atlas [en línea]. [consulta: 29 abril 2025]. Disponible en: <https://www.weather-atlas.com/en/spain/gijon-climate>.

AYUNTAMIENTO DE GIJÓN, 2023. Calidad del aire en Gijón /Xixón. Niveles de inmisión de los contaminantes atmosféricos [en línea]. S.I.: s.n. [consulta: 19 abril 2025]. Disponible en: <https://drupal.gijon.es/sites/default/files/2024-02/Memoria%20Red%20Aire%202023.pdf>.

BANCO CENTRAL EUROPEO, 1992. INFORME ANUAL 1992, ABRIL 1993. ,

BENITO, J.L. de, 2023. Así se transportará amoníaco verde desde España a Países Bajos. Energy News [en línea]. [consulta: 29 mayo 2025]. Disponible en: <https://www.energynews.es/asi-se-transportara-amoniaco-verde-desde-espana-a-paises-bajos/>.

BODDULA, R. y ASIRI, A.M., 2020. Sustainable Ammonia Production. Switzerland: Springer. Green Energy and Technology,

BOE, 2017. Real Decreto 656/2017, de 23 de junio. España: s.n. Reglamento de Almacenamiento de Productos Químicos y sus Instrucciones Técnicas Complementarias,

BOE, M.D.A.E., UNIÓN EUROPEA Y. COOPERACIÓN, 2025. Texto enmendado de los Anejos A y B del Acuerdo sobre transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera (ADR 2025). España: s.n.

BORA, N., KUMAR SINGH, A., PAL, P., KUMAR SAHOO, U., SETH, D., RATHORE, D., BHADRA, S., SEVDA, S., VENKATRAMANAN, V., PRASAD, S., SINGH, A., KATAKI, R. y KUMAR SARANGI, P., 2024. Green ammonia production: Process technologies and challenges. Fuel, vol. 369, pp. 131808. ISSN 00162361. DOI 10.1016/j.fuel.2024.131808.

BRANAN, C., 2005. Rules of thumb for chemical engineers: a manual of quick, accurate solutions to everyday process engineering problems. 4th ed. Amsterdam Boston: Elsevier. ISBN 978-0-7506-7856-8. 660

BROGAN, R.J., 2011. SHELL AND TUBE HEAT EXCHANGERS. Thermopedia [en línea]. S.l.: Begel House Inc., [consulta: 18 junio 2025]. ISBN 978-1-56700-456-4. Disponible en: <https://www.thermopedia.com/content/1121/>.

BRUCE I., N., 2016. DX AMMONIA PIPING HANDBOOK. 3rd Edition. Colville: Colmac Coil Manufacturing Inc.

BRUN, K. y KURZ, R., 2018. Compression Machinery for Oil and Gas. S.l.: Gulf Professional Publishing. ISBN 978-0-12-814684-2.

BYRNE, R.C., 2025. STANDARDS OF THE TUBULAR EXCHANGER MANUFACTURERS ASSOCIATION. ,

CENGEL, Y., 2018. Transferencia De Calor Y Masa [en línea]. 3a Edición. S.l.: s.n. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/TransferenciaDeCalorYMasaYunusCengelTerceraEdicion>.

CESCON, A. y JIANG, J.-Q., 2020. Filtration Process and Alternative Filter Media Material in Water Treatment. Water, vol. 12, no. 12, pp. 3377. ISSN 2073-4441. DOI 10.3390/w12123377.

CHANG, S.H. y RAJULI, M.F., 2024. An overview of pure hydrogen production via electrolysis and hydrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 84, pp. 521-538. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2024.08.245.

CHEEMA, I.I. y KREWER, U., 2018. Operating envelope of Haber–Bosch process design for power-to-ammonia. *RSC Advances*, vol. 8, no. 61, pp. 34926-34936. ISSN 2046-2069. DOI 10.1039/C8RA06821F.

Chemical Engineering. *Chemical Engineering* [en línea], 2014. [consulta: 19 junio 2025]. Disponible en: <https://www.chemengonline.com/pci-home/>.

Chemical_Process_Equipment_Selection_and_Design_Walas. S.l.: s.n.

CHOI, E., 2024. Guide to ASTM High Purity Water Quality Standards. Puretec Industrial Water [en línea]. [consulta: 25 abril 2025]. Disponible en: <https://puretecwater.com/resources/high-purity-water-quality-standards/>.

CINTROPUR, 2025. COMPRAR FILTRO DE AGUA CINTROPUR NW800 (3") ELIMINA SEDIMENTOS Y PARTÍCULAS SÓLIDAS. SETASA Filtración [en línea]. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: https://setasa.es/filtros-industriales/filtro-de-agua-cintropur-nw800-3-elimina-sedimentos-y-particulas-solidas.html?gad_source=1&gad_campaignid=22596051519&gbraid=0AAAAADdkjqlqDUnjJhyvih0efsWNoGT2N&gclid=Cj0KCQjwjJrCBhCXARIsAI5x66Wjx3W9ic1wQ_WZ570AiGkl0WaX3oYiAcIEiwWSshBnopkpNEwfDnUaArhwEALw_wcB.

CODESIGN ENGINEERING, 2023. ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Division 1 and Division 2. . S.l.: s.n.,

COLBURN, A.P. y HOUGEN, O.A., 1934. Design of Cooler Condensers for Mixtures of Vapors with Noncondensing Gases. *Industrial & Engineering Chemistry*, vol. 26, no. 11, pp. 1178-1182. ISSN 0019-7866. DOI 10.1021/ie50299a011.

COSTS OF INDIVIDUAL EQUIPMENT. *Chemical Process Equipment* [en línea], 2010. S.l.: Elsevier, pp. 717-726. [consulta: 12 junio 2025]. ISBN 978-0-12-372506-6. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123725066000198>.

COUPER, J.R., PENNEY, W.R., FAIR, J.R. y WALAS, S.M., 2012. 0 - Rules of Thumb: Summary. En: J.R. COUPER, W.R. PENNEY, J.R. FAIR y S.M. WALAS (eds.), *Chemical Process Equipment (Third Edition)* [en línea]. Boston: Butterworth-Heinemann, pp. xiii-xx. [consulta: 26 mayo 2025]. ISBN 978-0-12-396959-0. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780123969590000318>.

COUPER, J.R., PENNEY, W.R. y WALAS, S.M., 2010. Chemical Process Equipment. S.I.: Elsevier. ISBN 978-0-12-396959-0.

CuO catalyst (for removing oxygen from Nitrogen)-Hunan Xintan New Material CO.,Ltd. [en línea]. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: https://www.hnxintan.com/cpzx/CuO_catalyst_%28for_removing_oxygen_from_Nitrogen%29.html?utm_source=chatgpt.com.

D. ANNABLE, 1952. Application of the Temkin kinetic equation to ammonia synthesis in large-scale reactors. CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE. 4, vol. I.

Distillation Design. S.I.: s.n.

DYBKJAER, I., 1995. Ammonia Production Processes. . S.I.: s.n., vol. 6.

Dynalene MS-1 Technical Data Sheet [en línea]. S.I.: s.n. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: <https://www.dynalene.com/wp-content/uploads/2020/08/Dynalene-MS-1-Tech-Data-Sheet-Rev1.pdf>.

DYSON, D.C. y SIMON, J.M., 1968. Kinetic Expression with Diffusion Correction for Ammonia Synthesis on Industrial Catalyst. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, vol. 7, no. 4, pp. 605-610. ISSN 0196-4313. DOI 10.1021/i160028a013.

E-Cell Electrodeionization (EDI) Stack. , 2024.

ECOTROL® modular straight-way control valve | ARCA. ARCA Regler GmbH [en línea], 2025. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: <https://arca-valve.com/en/produkte/control-valves/ecotrol-control-valve/>.

ECOTROL, 2020. Ficha técnica válvula reductora de presión. 2020. S.I.: s.n.

EFUNDA. ENGINEERING FUNDAMENTALS. eFunda: Properties of Carbon Steel ASTM A285 Grade C. [en línea]. [consulta: 19 mayo 2025]. Disponible en: https://www.efunda.com/materials/alloys/carbon_steels/show_carbon.cfm?ID=ASTM_A285_GradeC&Page_Title=ASTM+A285+Grade+C&show_prop=all&utm_source=chatgpt.com.

EGUSQUIZA, S., 2011. EQUIPOS INDUSTRIALES Y MANTENIMIENTO: INTERCAMBIADOR DE CALOR. EQUIPOS INDUSTRIALES Y MANTENIMIENTO [en línea]. [consulta: 18 junio 2025]. Disponible en: <https://urpingindusteqymaq.blogspot.com/2011/05/intercambiador-de-calor.html>.

EIGENBERGER, G. y RUPPEL, W., 2012. Catalytic Fixed-Bed Reactors. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart, Stuttgart, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

EL-SHAFIE, M., 2023a. A comprehensive assessment of ammonia synthesis reaction kinetics and rate equations. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 92, pp. 35938-35952. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2023.06.011.

EL-SHAFIE, M., 2023b. Hydrogen production by water electrolysis technologies: A review. *Results in Engineering*, vol. 20, pp. 101426. ISSN 25901230. DOI 10.1016/j.rineng.2023.101426.

ENGINEERINGTOOLBOX, 2025. Hydrogen - Thermophysical Properties. [en línea]. [consulta: 7 julio 2025]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/hydrogen-d_1419.html.

Estimated Percent Rejection of Various Solutes by FILMTECTM Membranes. , 2019.

FICHA TÉCNICA FILTRO AUTOMÁTICO DECLORADOR, 2025. Ficha técnica filtro automático declorador (FDC) Hidrowater. S.l.: s.n. Ficha técnica filtro automático declorador (FDC) Hidrowater,

FICHA TÉCNICA MEMBRANA BW30HRLE 440, 2025. Ficha técnica membrana BW30HRLE 440 FilmTec. . S.l.: s.n.,

FICHAS TÉCNICAS CINTROPUR, 2025. Fichas tecnicas de filtros industriales y semiindustriales Cintropur. . S.l.: s.n.,

Filtro de Carbón Activo. H2agua| Equipos para tratamiento de agua [en línea], 2025. [consulta: 19 mayo 2025]. Disponible en: <https://www.h2agua.com/filtros-agua/lecho/filtro-declorador>.

Filtro declorador Mod. DCMg-500. Hidroserver [en línea], 2025. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: <http://tiendahidroserver.es/decloradores/129-Filtro-declorador-Mod-DCMg-500.html>.

Filtros de Carbón Activado Membrom. Membranas Osmosis Inversa [en línea], 2025. [consulta: 28 junio 2025]. Disponible en: <https://www.membrom-osmosis.com/filtros-de-carbon-activado/>.

FLOW OF FLUIDS. Chemical Process Equipment [en línea], 2010. S.l.: Elsevier, pp. 83-118. [consulta: 12 junio 2025]. ISBN 978-0-12-372506-6. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123725066000277>.

FOGLER, H.S., 2001. Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. Tercera. S.l.: Prentice Hall.

Fundamentals Of Heat And Mass Transfer Frank P Incropera [en línea]. S.l.: s.n. [consulta: 4 mayo 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/FundamentalsOfHeatAndMassTransferFrankPIncropera>.

GILLESPIE, L.J. y BEATTIE, J.A., 1930. The Thermodynamic Treatment of Chemical Equilibria in Systems Composed of Real Gases. I. An Approximate Equation for the Mass Action Function Applied to the Existing Data on the Haber Equilibrium. *Physical Review* [en línea], vol. 36, no. 4, pp. 743-753. [consulta: 15 junio 2025]. ISSN 0031-899X. DOI 10.1103/PhysRev.36.743. Disponible en: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.36.743>.

GOBIERNO DE ESPAÑA, 2013. Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. ,

GOBIERNO DEL PRINCIPADO DE ASTURIAS, 2022. Calidad del Aire en Asturias (2022). España: s.n.

GOODWIN, C.M., LÖMKER, P., DEGERMAN, D., DAVIES, B., SHIPILIN, M., GARCIA-MARTINEZ, F., KOROIDOV, S., KATJA MATHIESEN, J., RAMESHAN, R., RODRIGUES, G.L.S., SCHLUETER, C., AMANN, P. y NILSSON, A., 2024. Operando probing of the surface chemistry during the Haber–Bosch process. *Nature*, vol. 625, no. 7994, pp. 282-286. ISSN 1476-4687. DOI 10.1038/s41586-023-06844-5.

Green Ammonia Market Size, Share, Analysis & Forecast 2032. [en línea], 2024. [consulta: 19 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.rootsanalysis.com/reports/green-ammonia-market.html>.

GUTIÉRREZ MARTÍN, F., 2020. Ingeniería de procesos y productos. Madrid: Síntesis. ISBN 978-84-1357-034-1.

HAAR, L. y GALLAGHER, J.S., 1978. Thermodynamic properties of ammonia. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 7, no. 3, pp. 635-792. ISSN 0047-2689, 1529-7845. DOI 10.1063/1.555579.

HEAT TRANSFER AND HEAT EXCHANGERS. *Chemical Process Equipment* [en línea], 2010. S.l.: Elsevier, pp. 159-218. [consulta: 12 junio 2025]. ISBN 978-0-12-372506-6. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123725066000095>.

HEINZ BRAUNER y YAMANCHILI B.B. VARMA, 1981. Air Pollution Control Equipment. S.l.: s.n. ISBN 0-387-10463-1.

HENLEY, E.J. y SEADER, J.D., 2003. Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. México: Reverté. ISBN 978-968-6708-28-8.

HOU, J. y YANG, M., 2024. Green Hydrogen Production by Water Electrolysis [en línea]. 1. Boca Raton: CRC Press. [consulta: 5 marzo 2025]. ISBN 978-1-003-36893-9. Disponible en: <https://www.taylorfrancis.com/books/9781003368939>.

HU, S., GUO, B., DING, S., YANG, F., DANG, J., LIU, B., GU, J., MA, J. y OUYANG, M., 2022. A comprehensive review of alkaline water electrolysis mathematical modeling. *Applied Energy*, vol. 327, pp. 120099. ISSN 03062619. DOI 10.1016/j.apenergy.2022.120099.

HUMPHREYS, J., LAN, R. y TAO, S., 2021. Development and Recent Progress on Ammonia Synthesis Catalysts for Haber–Bosch Process. *Advanced Energy and Sustainability Research*, vol. 2, no. 1, pp. 2000043. ISSN 2699-9412. DOI 10.1002/aesr.202000043.

ICIS, 2016. Chemicals A-Z. [en línea]. [consulta: 4 marzo 2025]. Disponible en: <https://web.archive.org/web/20161125084558/http://www.icis.com:80/chemicals/channel-info-chemicals-a-z/>.

IMAR, 2025. Oxygen Price Index, Chart and Forecast 2025. [en línea]. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <https://www.imarcgroup.com/oxygen-pricing-report>.

INAMUDDIN, BODDULA, R. y ASIRI, A.M., 2020. Sustainable Ammonia Production [en línea]. Cham: Springer International Publishing. [consulta: 19 mayo 2025]. *Green Energy and Technology*, ISBN 978-3-030-35105-2. Disponible en: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-030-35106-9>.

Incoloy vs. Inconel: ¿Cuál es la diferencia? | Guía de aleaciones de níquel – Huaxiao Metal. [en línea], 2024. [consulta: 26 mayo 2025]. Disponible en: <https://es.huaxiaometal.com/Blogs/aleaci%C3%B3n-incoloy-vs-inconel.html>.

Inconel 625 Composición química y propiedades físicas - Conocimiento. [en línea], 2025. [consulta: 13 junio 2025]. Disponible en: <https://www.ssmsteels.com/info/inconel-625-chemical-composition-and-physical-17350975915549696.html>.

INCROPERA, F.P., 2013. Foundations of heat transfer : Frank P. Incropera ... [et al.] [en línea]. Singapore: John Wiley. [consulta: 29 mayo 2025]. ISBN 978-1-118-65358-6. Disponible en: <https://research.ebsco.com/linkprocessor/plink?id=4b02d4e8-ab66-30b0-8506-ee8e6a427b57>.

INDIAMART. Activated Alumina Desiccant - IndiaMART Export. [en línea]. [consulta: 30 mayo 2025]. Disponible en: https://export.indiamart.com/search.php?ss=activated%20alumina%20desiccant&tags=res:RC3|ktp:N0|stype:attr=1|mtp:S|wc:3|qr_nm:gd|cs:14487|com-cf:nl|ptrs:na|mc:21281|cat:132|qry_typ:P|lang:en|rtm:0-0-0-0-1-7-2|qrd:250529|mrd:250529|prdt:250530.

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE MINATITLÁN, 2020. Flujo a dos fases sistema gas-líquido. 2020. S.l.: s.n.

JACOBS, J.H., DEERING, C.E., LESAGE, K.L., STASHICK, M.J. y MARRIOTT, R.A., 2021. Rapid Cycling Thermal Swing Adsorption Apparatus: Commissioning and Data Analyses for Water Adsorption of Zeolites 4A and 13X Over 2000 Cycles. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 60, no. 19, pp. 7487-7494. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/acs.iecr.1c00469.

JACOBS, J.H., DEERING, C.E., SUI, R., LESAGE, K.L. y MARRIOTT, R.A., 2022. Degradation of desiccants in temperature swing adsorption processes: the temperature dependent degradation of zeolites 4A, 13X and silica gels. ,

JAN FOLKE, HUIQING SONG, JULIAN SCHITTKOWSKI, ROBERT SCHLO" GL, y HOLGER RULAND, 2020a. Oxygen Poisoning in Laboratory Testing of Iron-Based Ammonia Synthesis Catalysts and its Potential Sources. 2020. S.l.: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

JAN FOLKE, HUIQING SONG, JULIAN SCHITTKOWSKI, ROBERT SCHLO" GL, y HOLGER RULAND, 2020b. Oxygen Poisoning in Laboratory Testing of Iron-Based Ammonia Synthesis Catalysts and its Potential Sources. ,

JOSÉ IGNACIO LINARES HURTADO y MORATILLA SORIA, B.Y., 2007. El hidrógeno y la energía. Madrid: Asociación Nacional de Ingenieros del ICAI : Universidad Pontificia de Comillas. Avances de ingeniería. Análisis de situación y prospectiva de nuevas tecnologías energéticas, 2, ISBN 978-84-932772-9-1.

KHADEMI, M.H. y SABBAGHI, R.S., 2017. Comparison between three types of ammonia synthesis reactor configurations in terms of cooling methods. *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 128, pp. 306-317. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2017.10.021.

KIM, J., QI, M., KIM, M., LEE, J., LEE, I. y MOON, I., 2022. Biogas reforming integrated with PEM electrolysis via oxygen storage process for green hydrogen production: From design to robust optimization. *Energy Conversion and Management*, vol. 251, pp. 115021. ISSN 01968904. DOI 10.1016/j.enconman.2021.115021.

KUMAR, R., HUGGAHALLI, M., DENG, S. y ANDRECOVICH, M., 2003a. Trace Impurity Removal from Air. En: Company: SpringerDistributor: SpringerInstitution: SpringerLabel: Springernumber: 3publisher: Kluwer Academic Publishers, *Adsorption*, vol. 9, no. 3, pp. 243-250. ISSN 1572-8757. DOI 10.1023/A:1024701917647.

KUMAR, R., HUGGAHALLI, M., DENG, S. y ANDRECOVICH, M., 2003b. Trace Impurity Removal from Air. En: Company: SpringerDistributor: SpringerInstitution: SpringerLabel: Springernumber: 3publisher: Kluwer Academic Publishers, Adsorption, vol. 9, no. 3, pp. 243-250. ISSN 1572-8757. DOI 10.1023/A:1024701917647.

L. MC CABE, W., C. SMITH, J. y HARRIOTT, P., 2007. Operaciones unitarias en ingeniería química. Séptima edición. S.I.: Mc Graw Hill. Ingeniería Química, ISBN 970-10-6174-8.

LADSHAW, A., YIACOUMI, S., TSOURIS, C. y DEPAOLI, D., 2015. Generalized gas–solid adsorption modeling: Single-component equilibria. Fluid Phase Equilibria, vol. 388, pp. 169-181. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2015.01.003.

LAMIGUEIRO, M.G., LAIGLESIA, A.L., LASHERAS, E.G. y TRIOLA, J.T.. OBSERVATORIO SALUD Y MEDIO AMBIENTE: RUIDO Y SALUD. ,

LAWATE, S. y DESHMUKH, B.B., 2015. Analysis of Heads of Pressure Vessel. , vol. 4, no. 2,

LEWIS, B. y VON ELBE, G., 1960. Combustion, Flames and Explosions of Gases [en línea]. Second. S.I.: Elsevier. ISBN 978-1-4832-3155-6. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/C2013-0-12402-6>.

LI, B., ZHANG, H., ZHANG, W., HUANG, L., DUAN, J., HU, J. y YING, W., 2010. Cost effective activated carbon treatment process for removing free chlorine from water. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, vol. 5, no. 5, pp. 714-720. ISSN 1932-2135, 1932-2143. DOI 10.1002/apj.396.

LIAN, Y., DENG, S., LI, S., GUO, Z., ZHAO, L. y YUAN, X., 2019. Numerical analysis on CO2 capture process of temperature swing adsorption (TSA): Optimization of reactor geometry. International Journal of Greenhouse Gas Control, vol. 85, pp. 187-198. ISSN 17505836. DOI 10.1016/j.ijggc.2019.03.029.

LIU, C.-T, LINDSAY, W.T., y JR., 1970. Vapor Pressure of D2O from 106 to 300 oC. Journal of Chemical & Engineering Data [en línea], Disponible en: <https://doi.org/10.1021/jc60047a015>.

LIVE, 2024. Interactive: Ammonia price chart. Commodity Insights Live [en línea]. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <https://cilive.com/commodities/energy-transition/news-and-insight/051023-interactive-ammonia-price-chart-natural-gas-feedstock-europe-usgc-black-sea>.

MANUAL PARA MEMBRANAS RO-FILMTEC (EXTRACTO), 2022. Manual técnico de Membranas RO-FilmTec (extracto). Extracto del Manual técnico de membranas de ósmosis inversa FilmTec™ (Formulario n.º 45-D01504-en), capítulo 2, «Química del agua y pretratamiento». S.l.: s.n.,

MANUAL TÉCNICO DE MEMBRANAS RO-FILMTEC, 2024. RO-NF-FilmTec-Manual-45-D01504-en. 2024. S.l.: s.n.

MASAKI, Y., TAKAYA, O. y KEIICHI, N.I., 2024. Techno-economic analysis on recent heterogeneous catalysts for ammonia synthesis. 2024. S.l.: Elsevier Science & Technology.

Material de adsorción y tamices moleculares | Compresores BERG. berg Kompressoren [en línea], 2025. [consulta: 23 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.berg-kompressoren.de/es/repuestos/material-de-adsorcion/>.

MAX APPL, 2012. Ammonia Production Processes. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Germany: vol. 3.

MCCABE, W.L., SMITH, J.C. y HARRIOTT, P., 2007. Operaciones unitarias en ingeniería química. 7 ed. Madrid: McGraw-Hill. ISBN 978-84-481-1918-8.

MERZ, B., KUIJPERS, L., SOLOMON, S., O. ANDERSON, S., DAVIDSON, O., PONS, J., DE JAEGER, D., KESTIN, T., MANNING, M. y MEYER, L., 2005. Special Report: Safeguarding the Ozone Layer and the Global Climate System. [en línea]. S.l.: IPCC/TEAP. Disponible en: <https://www.ipcc.ch/report/safeguarding-the-ozone-layer-and-the-global-climate-system/>.

MESSER IBERICA DE GASES S.A. Fichas de seguridad de los gases - Messer Iberica de Gases S.A. [en línea]. [consulta: 12 junio 2025]. Disponible en: <https://www.messer.es/fichas-seguridad>.

MITECO, 2020. Hoja de Ruta del Hidrógeno [en línea]. España: s.n. [consulta: 2 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/ministerio/planes-estrategias/hidrogeno.html>.

MITECO, 2025. Red Natura 2000. Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico [en línea]. [consulta: 12 junio 2025]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000.html>.

MITECO. Banco de Datos de la Naturaleza. [en línea]. [consulta: 12 junio 2025]. Disponible en: <https://sig.miteco.gob.es/bdn/>.

MITECO, Miteco, 2019. Ficha técnica del amoníaco. España: s.n.

MITECO, Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, 2019. Fabricación de amoniaco (Emisiones de proceso). 2019. S.I.: s.n.

MOHAMMADI, A., JAFARSADEGH, M. y ARIAMANESH, A., 2015. Residence Time and Concentration Distribution in a Kenics Static Mixer. Chemical Engineering Communications, pp. 144-150. DOI DOI: 10.1080/00986445.2013.832225.

MOHAN, N.G. y RAMANUJAM, K., 2024. Electrocatalysts for ammonia synthesis: How close are we to the Haber-Bosch process? Current Opinion in Electrochemistry, vol. 45, pp. 101520. ISSN 2451-9103. DOI 10.1016/j.coelec.2024.101520.

Molecular Sieve 3A from China Manufacturer - Chemxin. [en línea], 2025. [consulta: 23 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.chemxin.com/Molecular-Sieve-3A-pd40934710.html>.

Molecular Sieve Desiccant | Zeolite Granules | Molecular Sieve Beads. [en línea]. [consulta: 25 junio 2025]. Disponible en: <https://www.molecularsievedesiccants.com/>.

NACIONES UNIDAS, 2015. Acuerdo de París. S.I.: s.n.

NAIR, M.P.S., 2001. Control corrosion factors in ammonia and urea plants. Travancore Cochin Chemicals Ltd,

NASA, 2025. Carbon Dioxide Concentration | NASA Global Climate Change. Climate Change: Vital Signs of the Planet [en línea]. [consulta: 7 abril 2025]. Disponible en: <https://climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide?intent=121>.

NIELSEN, A., 1995. Ammonia: Catalysis and Manufacture. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. ISBN 978-3-642-79199-4.

O. LEVENSPIEL, 1996. Flujo de Fluidos e Intercambio de Calor. S.I.: Reverté. ISBN 978-84-291-7968-2.

Obtención de nitrógeno y oxígeno a partir del aire. S.I.: s.n.

Obtencion de oxigeno a partir de aire atmosferico para su uso comercial. Estudio de viabilidad tecnica y economica. S.I.: s.n.

Orden MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos.

ORTLOFF, F., GRAF, F. y KOLB, T., 2014. Removal of Oxygen from Biogas via Catalytic Oxidation of Methane. ,

Packo General Industrial Series - Bomba centrífuga by Verder Liquids | DirectIndustry. [en línea]. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <https://www.directindustry.es/prod/verder-liquids/product-14215-2128141.html>.

PERRY, R.H. y GREEN, D.W., 1999. Perry's Chemical Engineer's Handbook. 7th. S.I.: McGraw-Hill. ISBN 0-07-049841-5.

Perry S Chemical Engineers Handbook Mc Graw Hill 8th Ed 2008 [en línea]. S.I.: s.n. [consulta: 4 julio 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/perryschemicalengineershandbookmcgrawhill8thed2008>.

Perry's Chemical Engineers' Handbook, 9th Edition [en línea]. S.I.: s.n. [consulta: 2 mayo 2025]. Disponible en: <http://archive.org/details/perrys-chemical-engineers-handbook-9th-edition>.

PETERS, Max S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003. Plant Design and Economics for Chemical Engineers. Fifth. S.I.: Mc Graw Hill. ISBN 0-07-239266-5.

PETERS, Max Stone, TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003a. Plant design and economics for chemical engineers. 5th ed. New York: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1. TP155.5 .P4 2003

PETERS, Max Stone, TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003b. Plant design and economics for chemical engineers. 5th ed. New York: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1. TP155.5 .P4 2003

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D., WEST, R.E. y WEST, R.E., 2004a. Plant design and economics for chemical engineers. 5. ed, international ed. 2003. Boston: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1.

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D., WEST, R.E. y WEST, R.E., 2004b. Plant design and economics for chemical engineers. 5. ed, international ed. 2004. Boston: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1.

PRTR ESPAÑA, 2025a. NOx (Óxidos de nitrógeno) | PRTR España. [en línea]. [consulta: 2 marzo 2025]. Disponible en: <https://prtr-es.es/NOx-oxidos-de-nitrogeno,15595,11,2007.html>.

PRTR ESPAÑA, 2025b. SOx (Óxidos de azufre) | PRTR España. [en línea]. [consulta: 2 marzo 2025]. Disponible en: <https://prtr-es.es/SOx-oxidos-de-azufre,15598,11,2007.html>.

QASIM, M., BADRELZAMAN, M., DARWISH, N.N., DARWISH, N.A. y HILAL, N., 2019. Reverse osmosis desalination: A state-of-the-art review. Desalination, vol. 459, pp. 59-104. ISSN 00119164. DOI 10.1016/j.desal.2019.02.008.

QI, M., PARK, J., LEE, I. y MOON, I., 2022. Liquid air as an emerging energy vector towards carbon neutrality: A multi-scale systems perspective. Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 159, pp. 112201. ISSN 1364-0321. DOI 10.1016/j.rser.2022.112201.

QUANTUM SPAIN, 2025. Botella Oxígeno Medicinal 50 Litros Cargada. Quantum Spain [en línea]. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <https://quantumspain.es/botellas-de-oxigeno-y-recargas/botella-de-oxigeno-medicinal-50-litros.html>.

RAHBARI, A., BRENNMAN, J., HENS, R. y RAMDIN, M., 2019. Supporting Information Solubility of Water in Hydrogen at High Pressures: A Molecular Simulation Study. ,

RAO, P. y MULLER, M., 2007. Industrial Oxygen: Its Generation and Use. ,

Real Decreto 506/2013, de 28 de junio, sobre productos fertilizantes.

Real Decreto 553/2020, de 2 de junio, por el que se regula el traslado de residuos en el interior del territorio del Estado.

REGE, S.U., YANG, R.T. y BUZANOWSKI, M.A., 2000. Sorbents for air prepurification in air separation. ,

RESEARCH GATE, 2025. Figure 3 : Compressor Operating ranges for selection [18, pp. 477] and... ResearchGate [en línea]. [consulta: 24 junio 2025]. Disponible en: https://www.researchgate.net/figure/Compressor-Operating-ranges-for-selection-18-pp-477-and-24-pp-1_fig5_274075209.

RIBEIRO, Ana.M., SAUER, T.P., GRANDE, C.A., MOREIRA, R.F.P.M., LOUREIRO, J.M.L. y RODRIGUES, A.E., 2008. Adsorption Equilibrium and Kinetics of Water Vapor on Different Adsorbents. ,

RIEDEL, E.R., 1964. Química industrial / Riegel ; dirigida por James A. Kent ; versión española por José M. Costa ; presentación por Ángel Vian. , [1a ed. en español].

RIZWAN, M., ALSTAD, V. y JÄSCHKE, J., 2021. Design considerations for industrial water electrolyzer plants. International Journal of Hydrogen Energy, vol. 46, no. 75, pp. 37120-37136. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2021.09.018.

RIZZI, E. y REDAELLI, L., 2009. Safety and Reliability in Ammonia Synthesis Converters. 2009. S.l.: s.n.

RUTHVEN, D.M., 1984. Principles of Adsorption and Adsorption Processes. S.l.: s.n.

RUTHVEN, D.M., 1994. Pressure Swing Adsorption. S.l.: s.n.

SALMON, N. y BAÑARES-ALCÁNTARA, R., 2021. Green ammonia as a spatial energy vector: a review [en línea]. 2021. S.l.: s.n. Disponible en: <https://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/se#!recentarticles&adv>.

SCHMIDT, O., GAMBHIR, A., STAFFELL, I., HAWKES, A., NELSON, J. y FEW, S., 2017. Future cost and performance of water electrolysis: An expert elicitation study.

International Journal of Hydrogen Energy, vol. 42, no. 52, pp. 30470-30492. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2017.10.045.

SENSOR ONE STOP, 2024. Tabla de grados de pureza del oxígeno: una guía completa de los niveles de pureza del oxígeno. [en línea]. [consulta: 17 marzo 2025]. Disponible en: <https://sensor1stop.com/es/knowledge/oxygen-purity/>.

SERVAPURE, 2025. Dupont Filmtec HRLE Element, BW30HRLE-440, 12,650 GPD. ServApure [en línea]. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: https://www.servapure.com/Dupont-Filmtec-HRLE-Element-BW30HRLE-440-12650-GPD_p_13758.html.

Shell-and-tube heat exchangers Standard series and customer oriented solutions. S.I.: s.n.

SHIVA KUMAR, S. y HIMABINDU, V., 2019. Hydrogen production by PEM water electrolysis – A review. Materials Science for Energy Technologies, vol. 2, no. 3, pp. 442-454. ISSN 25892991. DOI 10.1016/j.mset.2019.03.002.

SIGMAALDRICH, 2022. Ficha de seguridad del propilenglicol [en línea]. 29 noviembre 2022. S.I.: s.n. [consulta: 6 julio 2025]. Disponible en: file:///C:/Users/Usuario/Downloads/814588_SDS_CL_ES.PDF.

SIMÕES, S.G., CATARINO, J., PICADO, A., LOPES, T.F., DI BERARDINO, S., AMORIM, F., GÍRIO, F., RANGEL, C.M. y PONCE DE LEÃO, T., 2021. Water availability and water usage solutions for electrolysis in hydrogen production. Journal of Cleaner Production, vol. 315, pp. 128124. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2021.128124.

SINGLA, R. y CHOWDHURY, K., 2019. Comparisons of thermodynamic and economic performances of cryogenic air separation plants designed for external and internal compression of oxygen. Applied Thermal Engineering, vol. 160, pp. 114025. ISSN 13594311. DOI 10.1016/j.applthermaleng.2019.114025.

SINNOTT, R., 2005a. Chemical Engineering Design: Chemical Engineering Volume 6. 4th ed. Jordan Hill: Elsevier Science & Technology. Chemical Engineering Ser, ISBN 978-0-7506-6538-4.

SINNOTT, R., 2005b. Chemical Engineering Design: Chemical Engineering Volume 6. 4th ed. Jordan Hill: Elsevier Science & Technology. Chemical Engineering Ser, ISBN 978-0-7506-6538-4.

SINNOTT, R., 2005c. Chemical Engineering Design: Chemical Engineering Volume 6. 4th ed. Jordan Hill: Elsevier Science & Technology. Chemical Engineering Ser, ISBN 978-0-7506-6538-4.

SINNOTT, R.K. y TOWLER, G.P., 2019. Diseño en ingeniería química. Barcelona: Editorial Reverté. ISBN 978-84-291-9504-0.

Sistemas de agua EDI con electrodesionización - Pure Aqua, Inc. [en línea], 2025. [consulta: 1 mayo 2025]. Disponible en: <https://pureaqua.com/water-electrodeionization-systems/>.

Sitio web del Hidrógeno. Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico [en línea], 2025. [consulta: 4 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/energia/hidrocarburos-nuevos-combustibles/hidrogeno.html>.

Slug Catcher Multiphase CFD Modeling: Optimization and Comparison with Industrial Standards. Journal of Applied Fluid Mechanics [en línea], 2016. vol. 9, no. SI1, [consulta: 14 junio 2025]. ISSN 17353572, 17353645. DOI 10.36884/jafm.9.SI1.25816. Disponible en: https://www.jafmonline.net/article_1951_c33eb5729e7b64ff3da7008b2fbd224a.pdf.

SMITH, R., 2005. Chemical Process Design and Integration. ,

SMITH, R., 2016. Chemical Process Design and Integration. Segunda. S.I.: Wiley. ISBN 978-1-119-99013-0.

SODECA. Ventiladores centrífugos y extractores en línea para conductos. S.I.: s.n.

SPECIAL METALS CORPORATION, 2013. Inconel Alloy 625. ,

STORCH DE GRACIA, J.M. y GARCÍA MARTÍN, T., 2008. Seguridad Industrial en plantas químicas y energéticas. Fundamentos, evaluación de riesgos y diseño. 2a. S.I.: Díaz de Santos, S.A.

STULL, D.R., 1947. Vapor Pressure of Pure Substances. Organic and Inorganic Compunds. Industrial & Engineering Chemistry [en línea], Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie50448a022>.

SUTHERLAND, K., 2008. Filters and filtration handbook. 5e éd. Oxford: Elsevier/Butterworth-Heinemann. ISBN 978-1-85617-464-0. 660.284 245

Swallowglide - Bomba centrífuga by Celeros | DirectIndustry. [en línea]. [consulta: 29 junio 2025]. Disponible en: <https://www.directindustry.es/prod/celeros/product-102999-2640045.html>.

TALARICO, P. y SCOTTO, A., 2015. Reliable Design of Ammonia and Urea Plants. 2015. S.l.: s.n.

TEGEDER, F., 1966. Métodos de la industria química / Fritz Tegeder, Ludwig Mayer. ,

TEGEDER, F., 1967. Métodos de la industria química / Fritz Tegeder, Ludwig Mayer. ,

TEMPCO, 2011. Typical Heat Transfer Coefficients. 2011. S.l.: s.n.

The Chemical Engineering Plant Cost Index ®. Chemical Engineering [en línea], 2014. [consulta: 7 julio 2025]. Disponible en: <https://www.chemengonline.com/pci-home/>.

Therminol 68 Heat Transfer Fluid.

TOPSOE, 2025. KM1/KM1R The heart of the Ammonia Plant. 2025. S.l.: s.n.

TOTALENERGIES, 2025. ¿INSTALACIÓN MONOFÁSICA O TRIFÁSICA? TotalEnergies [en línea]. [consulta: 20 marzo 2025]. Disponible en: <https://www.totalenergies.es/es/pymes/blog/instalacion-monofasica-o-trifasica>.

TOWLER, Gavin y SINNOTT, R., 2008. Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design. Amsterdam Boston: Elsevier/Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-7506-8423-1.

TOWLER, Gavin P. y SINNOTT, R.K., 2008. Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design. Amsterdam; Boston: Elsevier/Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-7506-8423-1. TP155 .T69 2008

TREYBAL, R.E., 1988. OPERACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA,. ,

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID, 2007. Tecnología Química Industrial. [en línea], Disponible en: http://www.diquima.upm.es/old_diquima/docencia/tqindustrial/docs/cap_aire.pdf.

US20170023298A1. S.l.: s.n.

VALFONTA, 2016. Catálogo PRV. 2016. S.l.: s.n.

VIAN ORTUNO, A., 2012. Introduccion a la quimica industrial (2a. ed.). Place of publication not identified: Editorial Reverte. ISBN 978-84-291-9204-9.

WALAS, S.M., 1988. Chemical Process Equipment. S.l.: s.n.

WALAS, S.M., 1998. Chemical Process Equipment: Selection and Design. ,

WANG, S., WANG, Y., KUANG, Y., XU, S., GAO, S., LIU, L., NIU, H., XIAO, P. y HUANG, B., 2022. Adsorption behaviour of molecular sieve and activated carbon for CO2 adsorption at

cold temperatures. Carbon Neutrality, vol. 1, no. 1, pp. 16. ISSN 2731-3948. DOI 10.1007/s43979-022-00017-5.

WANKAT, P.C. y GONZÁLEZ Y POZO, V., 2008. Ingeniería de procesos de separación. 2a ed. México: Pearson Educación. ISBN 978-970-26-1281-0.

WEEL, J., DEGN, A., JOHN, B. y KJØBSTED, J., 2024. Comparison, operation and cooling design of three general reactor types for Power-to-Ammonia processes. ,

WILHEM RUPPEL, 2012. Catalytic Fixed-Bed Reactors. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Universita't Stuttgart, Stuttgart, Germany:

WOODS, D.R., 2007. Rules of Thumb in Engineering Practice. 2007. S.I.: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

WOSTBROCK ET AL. United States Patent (2006).

XIA, Y., ZHANG, C., WEI, X., GAO, J., YU, Y. y XIE, W., 2022. Enhancement effect on adsorbent utilization rate based on Twin-Bed tandem adsorption. Separation and Purification Technology, vol. 280, pp. 119914. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2021.119914.

XI' AN XINSHENGTAI, 2025. [Hot Item] EDI Module EDI System for Ultrapure Water 3000L/H. Made-in-China.com [en línea]. [consulta: 10 junio 2025]. Disponible en: <https://sxstwt.en.made-in-china.com/product/QJaRdgnAISVe/China-EDI-Module-EDI-System-for-Ultrapure-Water-3000L-H.html>.

XIANGRUN. PRODUCTION OF SORBENTS AND CATALYST. Activated alumina pellets. pseudo boehmite|activated alumina|alumina catalysts-Zibo Xiangrun [en línea]. [consulta: 20 mayo 2025]. Disponible en: <https://xradSORBENT.com/product-detail/activated-alumina-pellets/>.

z5y2E6_Perry-s_Chemical_Engineers-_Handbook. S.I.: s.n.

Zalia. Zalia, Zona de Actividades Logísticas e Industriales de Asturias [en línea]. [consulta: 3 mayo 2025]. Disponible en: <https://www.zalia.es/es/venta-de-parcelas/q3>.

ZENG, K. y ZHANG, D., 2010a. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 36, no. 3, pp. 307-326. ISSN 03601285. DOI 10.1016/j.pecs.2009.11.002.

ZENG, K. y ZHANG, D., 2010b. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 36, no. 3, pp. 307-326. ISSN 03601285. DOI 10.1016/j.pecs.2009.11.002.

ZHANG, P. y WANG, L., 2013. Numerical Analysis on the Performance of the Three-Bed Temperature Swing Adsorption Process for Air Prepurification. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 52, no. 2, pp. 885-898. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/ie302166z.

ZHANG, P., WANG, Z. y WANG, L., 2024. Performance study on an energy-efficient TSA air-purification process utilizing compression heat regeneration. *Separation and Purification Technology*, vol. 349, pp. 127854. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2024.127854.

APÉNDICE A: LISTA DE SÍMBOLOS

A.1. SÍMBOLOS LATINO

D	Diámetro de tubería
f_F	Factor de Fanning
G	Velocidad másica del fluido circulante
g	Aceleración de la gravedad
h	Altura del fluido en cada extremo del tramo
h_L	Pérdida de carga por fricción
k	Factor de expansión
L	Longitud
M	Parámetro para el cálculo del diámetro de tubería en líquidos
Ma	Número de Match
$\dot{m}$	Flujo másico
P	Presión
pm	Peso molecular
Q	Caudal volumétrico
Re	Número de Reynolds
T	Temperatura
T^*	Temperatura desplazada
u	Velocidad lineal

A.2. SÍMBOLOS GRIEGOS

ΔH	Diferencia de entalpía
ΔT	Diferencia de temperatura
ε/d	Rugosidad relativa
μ	Viscosidad
ρ	Densidad

A.3. ABREVIATURAS

AEM	Electrólisis de membrana de intercambio aniónico

FC	Flujo de caja
MITECO	Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico
PEM	Electrólisis de membrana polimérica protónica
PSA	adsorción por oscilación de presión
PPMv	Concentración en partes por millón en volumen
SOEC	Celda de electrolizador de óxido sólido
TSA	adsorción por oscilación de temperatura
VAN	Valor neto actualizado

A.4. NOMENCLATURA PROPIA DEL CÓDIGO ASME

c_c	Margen de grosor por corrosión
D_a	Diámetro del eje mayor del cabezal elipsoidal antes de la adición del margen por corrosión
E_j	Eficacia de junta
n	Parámetro de corrección dependiente del diámetro
P	Presión manométrica de operación
r_i	Radio interno de la carcasa antes de la adición del margen por corrosión
S	Presión máxima de trabajo
t	Grosor de la pared
W	Peso
ρ_m	Densidad del material

APÉNDICE B: TABLAS Y GRÁFICAS

B.1. TUBERÍAS E INSTRUMENTACIÓN

Tabla B.I. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección I. Parte 1.

	1 a 3	3.1	4.1	5	6	7
Flujo másico (kg/s)	5.4	5.4	5.4	5.3	5.2	0.5
Densidad (kg/m ³)	1.2	4.1	6.7	6.7	6.7	6.7
Viscosidad (Pa·s)	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$
Peso molecular (kg/mol)	0.029	0.029	0.029	0.029	0.029	0.029
Diámetro mínimo (m)	0.967	0.526	0.413	0.409	0.408	0.129
Diámetro normalizado (m)	1.047	0.547	0.447	0.447	0.447	0.136
Velocidad del fluido (m/s)	5	6	5	6	5	5
Número de Match	0.015	0.013	0.015	0.018	0.015	0.016
Número de Reynolds	$3.67 \cdot 10^5$	$6.95 \cdot 10^5$	$8.55 \cdot 10^5$	$8.39 \cdot 10^5$	$8.23 \cdot 10^5$	$2.73 \cdot 10^5$
Rugosidad relativa	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
Factor de fricción (Fanning)	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$
Velocidad másica del fluido (kg/m ² s)	6.2	22.9	34.1	40.1	33.4	36.1
Pérdida de carga por fricción (m/10 m)	0.7	1.6	1.7	2.6	1.6	6.2

Tabla B.II. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección I. Parte 2.

	7.1 y 7.2	8	8.1	8.2	8.3	9
Flujo másico (kg/s)	0.5	4.7	4.7	4.7	4.7	4.7
Densidad (kg/m ³)	0.8	6.7	13.6	18.1	36.9	49.1
Viscosidad (Pa·s)	$2.6 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$
Peso molecular (kg/mol)	0.029	0.029	0.029	0.029	0.029	0.029
Diámetro mínimo (m)	0.384	0.386	0.271	0.235	0.165	0.143
Diámetro normalizado (m)	0.397	0.397	0.279	0.227	0.163	0.136
Velocidad del fluido (m/s)	6	6	6	6	6	7
Número de Match	0.013	0.017	0.014	0.019	0.016	0.019
Número de Reynolds	$9.64 \cdot 10^5$	$8.41 \cdot 10^5$	$1.20 \cdot 10^6$	$1.42 \cdot 10^6$	$2.5 \cdot 10^6$	$2.46 \cdot 10^6$
Rugosidad relativa	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
Factor de fricción (Fanning)	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$
Velocidad másica del fluido (kg/m ² s)	4.4	38.1	77.2	116.7	226.3	325.1
Pérdida de carga por fricción (m/10 m)	2.3	2.4	3.3	5.3	6.7	9.4

Tabla B.III. Valores típicos de los términos de la Ecuación [9]

K	J	H_y	E	F	K_F	X
0.05	0.35	7 920	0.5	1.4	0.2	2.43

Tabla B.IV. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección III. Parte 1

	22.23	24	25	26	30	27	29	32.33
Tramos en paralelo	5	2	92	92	28	92	92	28
Flujo másico (kg/s)	8.3	20.7	0.4	2.3	1.1	2.0	1.9	0.3
Densidad (kg/m ³)	998.9	998.9	998.9	998.9	998.9	998.9	998.9	998.9
Viscosidad (Pa·s)	0.00111	0.00111	0.00111	0.00111	0.00111	0.00111	0.00111	0.00111
T (°C)	16	16	16	16	16	16	16	16
P1 (kPa)	101	980	980	980	980	980	880	880
P2 (kPa)	980	980	980	980	880	880	980	690
Peso molecular (kg/mol)	0.0018	0.0018	0.0018	0.0018	0.0018	0.0018	0.0018	0.0018
Diámetro mínimo (m)	0.088	0.132	0.024	0.050	0.036	0.046	0.045	0.021
Diámetro normalizado (m)	0.090	0.135	0.024	0.052	0.035	0.049	0.049	0.024
Velocidad del fluido (m/s)	1.30	1.46	0.97	1.07	1.18	1.04	0.98	0.74
Número de Reynolds	105 224	176 260	21 209	50 627	37 329	45 884	43 510	16 167
Rugosidad relativa 10 ⁵	2.66	1.78	9.88	4.57	6.84	4.88	4.88	9.88
Factor de fricción (Fanning)	0.0045	0.0040	0.0064	0.0052	0.0056	0.0053	0.0054	0.0069
Velocidad másica del fluido (kg/m ² s)	1 296.0	1 454.6	968.8	1 070.8	1 181.1	1 034.8	981.2	738.5
Pérdida de carga tubería (m)	0.170	0.129	0.507	0.233	0.456	0.238	0.216	0.315
Pérdida de carga accesorios (m)	0.00	0.20	0.09	0.10	0.29	0.000	0.000	0.000

Tabla B.V. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección III. Parte 2

	34	35	36	36.2	36.3	37	38	40
Tramos en paralelo	4	29	1	1	1	1	1	1
Flujo másico (kg/s)	2.4	0.3	0.78	0.78	0.78	0.78	0.78	0.77
Densidad (kg/m ³)	998.9	968.6	0.2	0.4	0.5	0.8	0.9	0.8
Viscosidad 10 ⁶ (Pa·s)	1 110.0	330.0	10.6	12.6	9.5	11.06	9.4	10.6
T (°C)	16	85	100	200	56	123	50	50
P1 (kPa)	690	350	300	689	639	1 225	1 175	993
P2 (kPa)	350	300	300	689	639	1 225	1 175	993
Peso molecular (kg/mol)	0.0018	0.0018	0.00205	0.0021	0.0021	0.0021	0.0021	0.0020
Diámetro mínimo (m)	0.050	0.020	0.502	0.373	0.323	0.256	0.236	0.256
Diámetro normalizado(m)	0.052	0.021	0.514	0.373	0.325	0.257	0.236	0.257
Velocidad del fluido (m/s)	1.11	0.93	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
Número de Reynolds	52 399	56 754	188 599	212 483	325 130	352 813	452 277	361 759
Rugosidad relativa 10 ⁵	5	11	478	644	743	938	1 017	937
Factor de fricción (Fanning)	0.0052	0.0052	0.0077	0.0083	0.0087	0.0093	0.0096	0.0093
Velocidad másica del fluido (kg/m ² s)	1 075.1	929.6	4.0	7.2	9.6	15.3	17.9	14.9
Pérdida de carga tubería (m)	0.235	0.461	12.46	18.24	21.92	29.79	33.14	29.72
Pérdida de carga accesorios (m)	0.60	0.07	938.84	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Tabla B.VI. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección V. Parte 1.

	47	48	49	50	51	52	53	54
Fase	Gas	Líquido	Gas	Gas	Líquido	Gas	Gas	Gas
Flujo másico (kg/s)	21.438	1.286	20.152	20.443	5.928	14.514	17.353	0.246
Densidad (kg/m ³)	34.1	588.0	73.8	76.8	675.0	83.5	89.0	89.0
Viscosidad (Pa·s)	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
Peso molecular (kg/mol)	0.010	0.017	0.009	0.009	0.017	0.009	0.009	0.009
Diámetro mínimo (m)	0.343	0.240	0.009	0.210	0.200	0.024	0.340	0.200
Diámetro normalizado (m)	0.346	0.243	0.243	0.219	0.205	0.024	0.343	0.203
Velocidad (m/s)	6.800	0.047	6.000	6.000	0.230	6.000	6.000	6.000
Número de Reynolds	$3.72 \cdot 10^6$	$7.14 \cdot 10^6$	$9.60 \cdot 10^4$	$9.21 \cdot 10^6$	$1.27 \cdot 10^6$	$9.70 \cdot 10^5$	$1.03 \cdot 10^7$	$1.23 \cdot 10^6$
Rugosidad relativa	0.030	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003
Factor de fricción (Fanning)	0.014	0.006	0.018	0.014	0.010	0.010	0.014	0.014
Velocidad másica del fluido (kg/m ² s)	227.952	27.732	434.519	441.450	157.382	385.313	525.629	530.076
Pérdida de carga tubería (m)	4.000	0.003	4.000	0.002	5.000	43.000	3.000	5.000
Pérdida de carga accesorios (m)	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabla XLII. Tabla completa del cálculo de diámetros normalizados para las tuberías de la sección V. Parte 2.

	55	56	57	58	59	61	62	64	66
Fase	Gas	Gas	Líquido	Líquido	Líquido	Gas	Líquido	Líquido	Líquido
Flujo másico (kg/s)	17.107	17.107	0.995	3.090	4.086	0.015	0.000	4.070	4.070
Densidad (kg/m ³)	98.7	44.9	588.0	675.0	649.1	12.0	792.2	561.3	673.1
Viscosidad (Pa·s)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Peso molecular (kg/mol)	0.010	0.009	0.017	0.017	0.038	0.007	0.017	0.017	0.017
Diámetro mínimo (m)	0.190	0.280	0.039	0.062	0.071	0.020	0.001	0.073	0.071
Diámetro normalizado (m)	0.194	0.288	0.039	0.063	0.074	0.017	0.006	0.074	0.074
Velocidad (m/s)	6.000	6.000	1.420	1.480	1.480	6.000	0.019	1.700	1.420
Número de Reynolds	$5.31 \cdot 10^6$	$9.02 \cdot 10^6$	$2.81 \cdot 10^5$	$2.55 \cdot 10^5$	$3.60 \cdot 10^5$	$2.18 \cdot 10^5$	$3.52 \cdot 10^2$	$7.16 \cdot 10^5$	$2.88 \cdot 10^5$
Rugosidad relativa	0.003	0.003	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.000	0.000
Factor de fricción (Fanning)	0.014	0.014	0.004	0.004	0.004	0.014	0.027	0.003	0.004
Velocidad másica del fluido (kg/m ² s)	580.519	261.870	833.154	991.349	949.944	65.467	14.049	946.391	946.391
Pérdida de carga tubería (m)	5.000	4.000	0.405	0.273	0.216	65.000	$3.267 \cdot 10^{-3}$	0.259	0.208
Pérdida de carga accesorios (m)	-	-	4.089	6.586	3.706	-	0.120	0.245	-



Philadelphia Regional Center
2450 Wheatshaaf Lane
Philadelphia, PA 19137
O 215-831-0700
F 215-533-1645
E sales@tiogapipe.com

Houston Regional Center
14950 Heathrow Forest Parkway,
Suite 390, Houston, TX 77032
O 713-433-2111
F 281-397-0132
E sales@tiogapipe.com

Chattanooga Regional Center
1301 Riverfront Parkway, Suite 108
Chattanooga, TN 37402
O 423-899-3398
F 423-899-9695
E sales@tiogapipe.com

PIPE DIMENSIONS AND WEIGHTS

Available in commercial and nuclear

U.S./METRIC

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
INCH MM	INCH MM	ASME		INCH MM	MM	LBS/ FOOT KG/ METER		INCH MM	MM
1/8 6	0.405 10.3	10 STD 40 XS 80	105 405 805	0.049 0.068 0.095	1.24 1.73 2.41	0.19 0.24 0.31	0.28 0.37 0.47	0.307 0.269 0.215	7.82 6.84 5.84
1/4 8	0.540 13.7	10 STD 40 XS 80	105 405 805	0.065 0.088 0.119	1.65 2.24 3.02	0.33 0.43 0.54	0.49 0.63 0.80	0.410 0.364 0.302	10.40 9.22 7.66
3/8 10	0.675 17.1	10 STD 40 XS 80	105 405 805	0.065 0.091 0.126	1.65 2.31 3.20	0.42 0.57 0.74	0.63 0.84 1.10	0.545 0.493 0.423	13.80 12.48 10.70
1/2 15	0.840 21.3	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.065 0.083 0.109 0.147 0.188 0.294	1.65 2.11 2.77 3.73 4.78 7.47	0.54 0.67 0.85 1.09 1.31 1.72	0.80 1.00 1.27 1.62 1.95 2.55	0.710 0.674 0.622 0.546 0.464 0.252	18.00 17.08 15.76 13.84 11.74 6.36
3/4 20	1.050 26.7	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.065 0.083 0.113 0.154 0.219 0.308	1.65 2.11 2.87 3.91 5.56 7.82	0.69 0.86 1.13 1.48 1.95 2.44	1.03 1.28 1.69 2.20 2.90 3.64	0.920 0.884 0.824 0.742 0.612 0.434	23.40 22.48 20.96 18.88 15.58 11.06
1 25	1.315 33.4	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.065 0.109 0.133 0.179 0.250 0.358	1.65 2.77 3.38 4.55 6.35 9.09	0.87 1.41 1.68 2.17 2.85 3.66	1.29 2.09 2.50 3.24 4.24 5.45	1.185 1.097 1.049 0.957 0.815 0.599	30.10 27.86 26.64 24.30 20.70 15.22
1-1/4 32	1.660 42.2	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.065 0.109 0.140 0.191 0.250 0.382	1.65 2.77 3.56 4.85 6.35 9.70	1.11 1.81 2.27 3.00 3.77 5.22	1.65 2.69 3.39 4.47 5.61 7.77	1.530 1.442 1.380 1.278 1.160 0.896	38.90 36.66 35.08 32.50 29.50 22.80
1-1/2 40	1.900 48.3	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.065 0.109 0.145 0.200 0.281 0.400	1.65 2.77 3.68 5.08 7.14 10.15	1.28 2.09 2.72 3.63 4.86 6.41	1.90 3.11 4.05 5.41 7.25 9.55	1.770 1.682 1.610 1.500 1.338 1.100	45.00 42.76 40.94 38.14 34.02 28.00
2 50	2.375 60.3	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.065 0.109 0.154 0.218 0.344 0.436	1.65 2.77 3.91 5.54 7.47 11.07	1.61 2.64 3.66 5.03 7.48 9.04	2.39 3.93 5.44 7.48 11.11 13.44	2.245 2.157 2.067 1.939 1.687 1.503	57.00 54.76 52.48 49.22 42.82 38.16
2-1/2 65	2.875 73.0	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.083 0.120 0.203 0.276 0.375 0.552	2.11 3.05 5.16 7.01 9.53 14.02	2.48 3.53 5.80 7.67 10.02 13.71	3.69 5.26 8.63 11.41 14.92 20.39	2.709 2.635 2.469 2.323 2.125 1.771	68.78 66.90 62.68 58.98 53.94 44.96
3 80	3.500 88.9	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.083 0.120 0.216 0.300 0.438 0.600	2.11 3.05 5.49 7.62 11.13 15.24	3.03 4.34 7.58 10.26 14.34 18.60	4.52 6.46 11.29 15.27 21.35 27.68	3.334 3.260 3.068 2.900 2.624 2.300	84.68 82.80 77.92 73.66 66.64 58.42
3-1/2 90	4.000 101.6	5 10 STD 40 XS 80 160 XX	55 105 405 805	0.083 0.120 0.226 0.318 0.436	2.11 3.05 5.74 8.08 11.15	3.48 4.98 9.12 12.52 16.15	5.18 7.41 13.57 18.64 24.03	3.834 3.760 3.548 3.364 2.728	97.38 95.50 90.12 85.44 69.30
4 100	4.500 114.3	5 10 STD 40 XS 80 120 160 XX	55 105 405 805	0.083 0.120 0.156 0.188 0.237 0.337 0.438 0.531 0.674	2.11 3.05 3.96 4.78 6.02 8.56 11.13 13.49 17.12	3.92 5.62 7.24 8.67 10.80 15.00 19.02 22.53 27.57	5.84 8.37 10.78 12.91 16.08 22.32 28.32 33.54 41.03	4.334 4.260 4.188 4.124 4.026 3.826 3.624 3.438 3.152	110.08 108.20 106.38 104.74 102.26 97.18 92.04 87.32 80.06
4-1/2 115	5.000 127.0	STD XS 80 XX	405 805	0.355 0.710	9.02 18.03	17.63 32.56	26.24 48.45	4.290 3.580	108.96 90.94

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
INCH MM	INCH MM	ASME		INCH	MM	LBS/ FOOT	KG/ METER	INCH	MM
5 125	5.563 141.3	5	5S	0.109	2.77	6.36	9.46	5.345	135.76
		10	10S	0.134	3.40	7.78	11.56	5.295	134.50
		STD	40	0.258	6.55	14.63	21.77	5.047	128.20
		XS	80	0.375	9.53	20.80	30.97	4.813	122.24
		120		0.500	12.70	27.06	40.28	4.563	115.90
		160		0.625	15.88	32.99	49.12	4.313	109.54
		XX		0.750	19.05	38.59	57.43	4.063	103.20
6 150	6.625 168.3	5	5S	0.109	2.77	7.59	11.31	6.407	162.76
		10	10S	0.134	3.40	9.30	13.83	6.330	161.11
				0.188	4.78	12.94	19.28	6.249	158.74
		STD	40	0.280	7.11	18.99	28.26	6.065	154.08
		XS	80	0.432	10.97	28.60	42.56	5.761	146.36
		120		0.562	14.27	36.43	54.21	5.501	139.76
		160		0.719	18.26	45.39	67.57	5.187	131.78
XX		0.864	21.95	53.21	79.22	4.897	124.40		
7 175	7.625 193.7	STD	40	0.301	7.65	23.57	35.10	7.023	178.40
		XS	80	0.500	12.70	38.08	56.69	6.625	168.30
		XX		0.875	22.23	63.14	94.00	5.875	149.24
8 200	8.625 219.1		5S	0.109	2.77	9.92	14.78	8.407	213.56
			10S	0.148	3.76	13.41	19.97	8.329	211.58
		20		0.250	6.35	22.38	33.32	8.125	206.40
		30		0.277	7.04	24.72	36.82	8.071	205.02
		STD	40	0.322	8.18	28.58	42.55	7.981	202.74
		60		0.406	10.31	35.67	53.09	7.813	198.48
		XS	80	0.500	12.70	43.43	64.64	7.625	193.70
		100		0.594	15.09	51.00	75.92	7.437	188.92
		120		0.719	18.26	60.77	90.44	7.187	182.58
		140		0.812	20.62	67.82	100.93	7.001	177.86
		XX		0.875	22.23	72.49	107.93	6.875	174.64
		160		0.906	23.01	74.76	111.27	6.813	173.08
9 225	9.625 244.5	STD	40	0.342	8.69	33.94	50.54	8.941	227.12
		XS	80	0.500	12.70	48.77	72.60	8.625	219.10
		XX		0.875	22.23	81.85	121.85	7.875	200.04
10 250	10.750 273.0		5S	0.134	3.40	15.21	22.61	10.482	266.20
			10S	0.165	4.19	18.67	27.78	10.420	264.62
				0.188	4.78	21.23	31.62	10.374	263.44
				0.250	6.35	28.06	41.76	10.250	260.30
		20		0.307	7.80	34.27	51.01	10.136	257.40
		30		0.365	9.27	40.52	60.29	10.020	254.46
		STD	40	0.500	12.70	54.79	81.53	9.750	247.60
		60		0.594	15.09	64.49	95.98	9.562	242.82
		80		0.719	18.26	77.10	114.71	9.312	236.48
		100		0.844	21.44	89.38	133.01	9.062	230.12
		120		1.000	25.40	104.23	155.10	8.750	222.20
		140		1.125	28.58	115.75	172.27	8.500	215.84
160									
11 275	11.750 298.5	STD	40	0.375	9.53	45.60	67.91	11.000	279.44
		XS	80	0.500	12.70	60.13	89.51	10.750	273.10
		XX		0.875	22.23	101.72	151.46	10.000	254.04
12 300	12.750 323.8		5S	0.156	3.96	21.00	31.24	12.438	315.88
			10S	0.180	4.57	24.19	35.98	12.390	314.66
				0.188	4.78	25.25	37.61	12.374	314.24
				0.250	6.35	33.41	49.71	12.250	311.10
		20		0.330	8.38	43.81	65.19	12.090	307.04
		30		0.375	9.53	49.61	73.86	12.000	304.74
		STD	40	0.406	10.31	53.57	79.71	11.938	303.18
		XS	80	0.500	12.70	65.48	97.44	11.750	298.40
		60		0.562	14.27	73.22	108.93	11.626	295.26
		80		0.688	17.48	88.71	132.05	11.374	288.84
		100		0.844	21.44	107.42	159.87	11.062	280.92
		120		1.000	25.40	125.61	186.92	10.750	273.00
140		1.125	28.58	139.81	208.08	10.500	266.64		
160		1.312	33.32	160.42	238.69	10.126	257.16		
14 350	14.000 355.6		10S	0.188	4.78	27.76	41.36	13.624	346.04
				0.250	6.35	36.75	54.69	13.500	342.90
		20		0.312	7.92	45.65	67.91	13.376	339.76
		STD	30	0.375	9.53	54.62	81.33	13.250	336.54
		40		0.438	11.13	63.50	94.55	13.124	333.34
		XS	80	0.500	12.70	72.16	107.40	13.000	330.20
		60		0.594	15.09	85.13	126.72	12.812	325.42
		80		0.750	19.05	106.23	158.11	12.500	317.50
		100		0.938	23.83	130.98	194.98	12.124	307.94
		120		1.094	27.79	150.93	224.66	11.812	300.02
		140		1.250	31.75	170.37	253.58	11.500	292.10
		160		1.406	35.71	189.29	281.72	11.188	284.18

Fig. B.1. Diámetros normalizados de tuberías, primera parte. («tioga-pipe-chart»).

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS	WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
INCH MM	INCH MM	ASME	INCH	MM	LBS/ FOOT	KG/ METER	INCH	MM
16 400	16.000 406.4	10 10S 20 STD 30 40S XS 40 80S 60 80 100 120 140 160	0.188 0.250 0.312 0.375 0.500 0.656 0.844 1.031 1.219 1.438 1.594	4.78 6.35 7.92 9.53 12.70 16.66 21.44 26.19 30.96 36.53 40.49	31.78 42.09 52.32 62.64 82.85 107.60 136.74 164.98 192.61 223.85 245.48	47.34 62.65 77.83 93.27 123.31 160.13 203.54 245.57 286.66 333.21 365.38	15.624 15.500 15.376 15.250 15.000 14.688 14.312 13.938 13.562 13.124 12.812	396.84 393.70 390.56 387.34 381.00 373.08 363.52 354.02 344.48 333.34 325.42
18 450	18.000 457	10 10S 20 STD 40S XS 80S 40 60 80 100 120 140 160	0.188 0.250 0.312 0.375 0.438 0.500 0.562 0.750 0.938 1.156 1.375 1.562 1.781	4.78 6.35 7.92 9.53 11.13 12.70 14.27 19.05 23.83 29.36 34.93 39.67 45.24	35.80 47.44 58.99 70.65 82.23 93.54 104.76 138.30 171.08 208.15 244.37 274.48 308.79	53.31 70.57 87.71 105.17 122.38 139.16 155.81 205.75 254.57 309.64 363.58 408.28 459.39	17.624 17.500 17.376 17.250 17.124 17.000 16.876 16.500 16.124 15.688 15.250 14.876 14.438	447.44 444.30 441.16 437.94 434.74 431.60 428.46 418.90 409.34 398.28 387.14 377.66 366.52
20 500	20.000 508	10 10S 20 40S XS 30 80S 40 60 80 100 120 140 160	0.218 0.250 0.375 0.500 0.594 0.812 1.031 1.281 1.500 1.750 1.969	5.54 6.35 9.53 12.70 15.09 20.62 26.19 32.54 38.10 44.45 50.01	46.10 52.78 78.67 104.23 123.23 166.56 209.06 256.34 296.65 341.41 379.53	68.61 78.56 117.15 155.13 183.43 247.84 311.19 381.55 441.52 508.15 564.85	19.564 19.500 19.250 19.000 18.812 18.376 17.938 17.438 17.000 16.500 16.062	496.92 495.30 488.94 482.60 477.82 466.76 455.62 442.92 431.80 419.10 407.98
22 550	22.000 559	10 10S 20 40S XS 30 80S 60 80 100 120 140 160	0.218 0.250 0.375 0.500 0.875 1.125 1.375 1.625 1.875 2.125	5.54 6.35 9.53 12.70 22.23 28.58 34.93 41.28 47.63 53.98	50.76 58.13 86.69 114.92 197.60 251.05 303.16 353.94 403.38 451.49	75.55 86.55 129.14 171.10 294.27 373.85 451.45 527.05 600.67 672.30	21.564 21.500 21.250 21.000 20.250 19.750 19.250 18.750 18.250 17.750	547.92 546.30 539.94 533.60 514.54 501.84 489.14 476.44 463.74 451.04
24 600	24.000 610	10 10S STD 20 40S XS 80S 30 40 60 80 100 120 140 160	0.250 0.375 0.500 0.562 0.688 0.969 1.219 1.531 1.812 2.062 2.344	6.35 9.53 12.70 14.27 17.48 24.61 30.96 38.89 46.02 52.37 59.54	63.47 94.71 125.61 140.81 171.45 238.57 296.86 367.74 429.79 483.57 542.64	94.53 141.12 187.07 209.65 255.43 355.28 442.11 547.74 640.07 720.19 808.27	23.500 23.250 23.000 22.876 22.624 22.062 21.562 20.938 20.376 19.876 19.312	597.30 590.94 584.60 581.46 575.04 560.78 548.08 532.22 517.96 505.26 490.92
26 650	26.000 660	10 10S STD 40S XS 80S	0.312 0.375 0.500	7.92 9.53 12.70	85.68 127.36 136.30	127.36 152.88 202.74	25.376 25.250 25.000	644.16 640.94 634.60
28 700	28.000 711	10 10S STD 40S XS 20 80S 30	0.312 0.375 0.500 0.625	7.92 9.53 12.70 15.88	92.35 110.74 146.99 182.90	137.32 164.86 218.71 272.23	27.376 27.250 27.000 26.750	695.16 691.94 685.60 679.24
30 750	30.000 762	10 10S STD 40S XS 20 80S 30	0.312 0.375 0.500 0.625	7.92 9.53 12.70 15.88	99.02 118.76 157.68 196.26	147.29 176.85 234.68 292.20	29.376 29.250 29.000 28.750	746.16 742.94 736.60 730.24
32 800	32.000 813	10 10S STD 40S XS 20 80S 30 40	0.312 0.375 0.500 0.625 0.688	7.92 9.53 12.70 15.88 17.48	105.69 126.78 168.37 209.62 230.29	157.25 188.83 250.65 312.17 342.94	31.376 31.250 31.000 30.750 30.624	797.16 793.94 787.60 781.24 778.04
34 850	34.000 864	10 10S STD 40S XS 20 80S 30 40	0.312 0.375 0.500 0.625 0.688	7.92 9.53 12.70 15.88 17.48	112.36 134.79 179.06 222.99 245.00	167.21 200.82 266.63 332.14 364.92	33.376 33.250 33.000 32.750 32.624	848.16 844.94 838.60 832.24 829.04
36 900	36.000 914	10 10S STD 40S XS	0.312 0.375 0.500	7.92 9.53 12.70	119.03 142.81 189.75	176.97 212.57 282.29	35.376 35.250 35.000	898.16 894.94 888.60
42 1050	42.000 1067	STD 40S XS	0.375 0.500 0.625 0.750	9.53 12.70 15.88 19.05	166.86 221.82 276.44 330.72	248.53 330.21 411.64 492.33	41.250 41.000 40.750 40.500	1047.94 1041.60 1035.24 1028.90
48 1200	48.000 1219	STD 40S XS	0.375 0.500	9.53 12.70	190.92 253.89	284.25 377.81	47.250 47.000	1199.94 1193.60

$LB/foot = (Outside\ diameter\ [in.] - Wall\ Thickness\ [in.]) \times (Wall\ Thickness\ [in.]) \times (10.69)$
 $KG/Meter = (Outside\ diameter\ [mm] - Wall\ Thickness\ [mm]) \times (Wall\ Thickness\ [mm]) \times (0.0246615)$

Fig. B.2. Diámetros normalizados de tuberías, segunda parte («tioga-pipe-chart»).

B.2. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA

Tabla B.VII. Cascada de energía de la curva compuesta caliente. Parte 1.

T _{caliente} (°C)	I.3.1	I.8.1	I.8.3	II.9	III.36 .2	III.37	IV.16 .3	IV.16 .5	IV.16 .7	IV.40	IV.40 .2
451.0											
417.0											
400.0											
200.0											
195.0					11.0						
180.2	5.4				11.0						
162.8	5.4				11.0						
142.8	5.4				11.0				3.7		
130.0	5.4				11.0				3.7		
129.1	5.4				11.0				3.7		
123.3	5.4				11.0			3.7	3.7		
110.0	5.4				11.0	10.9		3.7	3.7		
100.0	5.4	4.9	4.9		11.0	10.9		3.7	3.7		
99.1	5.4	4.9	4.9		11.0	10.9		3.7			
90.0	5.4	4.9	4.9		11.0	10.9		3.7			11.0
60.0	5.4	4.9	4.9		11.0	10.9		3.7			11.0
56.0	5.4	4.9	4.9		11.0	10.9		3.7			
50.0	5.4	4.9	4.9			10.9		3.7			
49.7	5.4	4.9	4.9							0.8	
42.0	5.4	4.9	4.9							0.8	
25.0	5.4	4.9	4.9				3.7			0.8	
15.0	5.4	4.9	4.9								
-12.9				5.1							
-30.0				5.1							
-85.0				5.1							
-142.8											

Tabla B.VIII. Cascada de energía de la curva compuesta caliente. Parte 2.

T_{caliente} (°C)	IV.40.4	IV.40.6	IV.46	V.47	V.49	V.61	ΔT (°C)	CP (kW/°C)	$\Delta H_{C,\text{int}}$ (kW)	H_C (kW)
451.0										50 185.1
417.0			93.3				34.0	93.3	3 171.0	47 014.1
400.0			93.3	78.3			17.0	171.6	2 916.6	44 097.5
200.0				78.3			200.0	78.3	15 660.4	28 437.1
195.0				78.3			5.0	89.3	446.4	27 990.8
180.2				78.3			14.8	94.7	1 401.4	26 589.4
162.8		11.1		78.3			17.4	105.8	1 840.4	24 749.0
142.8		11.1		78.3			20.0	109.5	2 189.9	22 559.1
130.0	11.1	11.1		78.3			12.8	120.6	1 543.1	21 016.0
129.1	11.1			78.3			0.9	109.5	98.5	20 917.5
123.3	11.1			78.3			5.8	113.2	656.5	20 261.0
110.0	11.1			78.3			13.3	124.1	1 650.6	18 610.3
100.0	11.1			78.3			10.0	133.9	1 338.5	17 271.8
99.1	11.1			78.3			0.9	130.1	117.1	17 154.7
90.0	11.1			78.3			9.1	141.2	1 284.5	15 870.2
60.0				78.3			30.0	130.1	3 902.8	11 967.4
56.0				78.3			4.0	119.1	476.3	11 491.2
50.0				78.3			6.0	108.1	648.6	10 842.6
49.7				78.3			0.3	94.3	27.3	10 815.2
42.0				78.3			7.7	94.3	726.8	10 088.5
25.0				78.3			17.0	98.0	1 665.6	8 422.9
15.0					140.7		10.0	155.9	1 558.7	6 864.1
-12.9					140.7		27.9	145.8	4 062.8	2 801.4
-30.0					140.7	0.2	17.1	146.0	2 502.2	299.2
-85.0						0.2	55.0	5.3	290.0	9.2
-142.8						0.2	57.8	0.2	9.2	0.0



Tabla B.IX. Cálculo de ΔH_{int} (kW) y cascada de energía del proceso. Parte 1

T* (°C)	I.3.1	I.8.1	I.8.3	II.9	II.16	II.21	III.34	III.36.2	III.37	IV.16.3	IV.16.5	IV.16.7	IV.40
441.0													
407.0													
390.0													
210.0													
200.0													
190.0													
185.0								11.0					
170.2	5.4							11.0					
152.8	5.4							11.0					
132.8	5.4							11.0				3.7	
120.0	5.4							11.0				3.7	
119.1	5.4							11.0				3.7	
113.3	5.4							11.0			3.7	3.7	
100.0	5.4	4.9	4.9					11.0	10.9		3.7	3.7	
95.0	5.4	4.9	4.9					11.0	10.9		3.7	3.7	
90.0	5.4	4.9	4.9				39.0	11.0	10.9		3.7	3.7	
89.1	5.4	4.9	4.9				39.0	11.0	10.9		3.7		
80.0	5.4	4.9	4.9				39.0	11.0	10.9		3.7		
60.0	5.4	4.9	4.9				39.0	11.0	10.9		3.7		
59.7	5.4	4.9	4.9			1.7	39.0	11.0	10.9		3.7		
50.0	5.4	4.9	4.9			1.7	39.0	11.0	10.9		3.7		
46.0	5.4	4.9	4.9			1.7	39.0	11.0	10.9		3.7		
40.0	5.4	4.9	4.9			1.7	39.0		10.9		3.7		
32.0	5.4	4.9	4.9			1.7	39.0						0.8
26.0	5.4	4.9	4.9			1.7	39.0			3.7			0.8
15.0	5.4	4.9	4.9			1.7				3.7			0.8
5.0	5.4	4.9	4.9			1.7							
-2.9				5.1		1.7							
-22.9				5.1		1.7							
-24.9				5.1		1.7							
-40.0				5.1		1.7							
-90.0				5.1		1.7							
-95.0				5.1	3.7	1.7							
-152.8					3.7	1.7							
-171.6					3.7	1.7							
-184.0					3.7								

Tabla B.X. Cálculo de ΔH_{int} (kW) y cascada de energía del proceso. Parte 2

IV.40.2	IV.40.4	IV.40.6	IV.46	V.47	V.49	V.61	V.64	V.55	ΔT^*_{int} (°C)	ΣCP_{int} (kW/°C)	ΔH_{int} (kW)
			93.3						34.0	93.3	3 171.0
			93.3	78.3					17.0	171.6	2 916.6
				78.3					180.0	78.3	14 094.4
				78.3				63.0	10.0	15.3	152.8
				78.3				63.0	10.0	15.3	152.8
				78.3				63.0	5.0	26.3	131.3
				78.3				63.0	14.8	31.7	468.7
				78.3				63.0	17.4	42.8	743.9
		11.1		78.3				63.0	20.0	46.5	929.5
		11.1		78.3				63.0	12.8	57.5	736.4
	11.1	11.1		78.3				63.0	0.9	46.5	41.8
	11.1			78.3				63.0	5.8	50.2	291.0
	11.1			78.3				63.0	13.3	61.1	812.4
	11.1			78.3				63.0	5.0	70.8	354.2
	11.1			78.3				63.0	5.0	31.8	159.1
	11.1			78.3				63.0	0.9	28.1	25.3
11.0	11.1			78.3				63.0	9.1	39.1	356.0
11.0				78.3				63.0	20.0	28.1	561.2
11.0				78.3				63.0	0.3	27.1	7.9
11.0				78.3			20.2	63.0	9.7	6.9	67.2
				78.3			20.2	63.0	4.0	-4.1	-16.4
				78.3			20.2	63.0	6.0	-15.1	-90.5
				78.3			20.2	63.0	8.0	-28.9	-231.3
				78.3			20.2	63.0	6.0	-25.2	-151.2
				78.3			20.2	63.0	11.0	13.8	151.9
					140.7		20.2	63.0	10.0	71.7	717.1
					140.7		20.2	63.0	7.9	61.7	484.7
					140.7			63.0	20.0	81.8	1 636.7
					140.7	0.2		63.0	2.0	82.0	167.3
					140.7	0.2			15.1	145.0	2 189.8
						0.2			50.0	4.3	215.1
						0.2			5.0	0.6	2.8
						0.2			57.8	-4.5	-262.7
									18.8	-4.7	-88.4
									12.4	-3.7	-46.29

Tabla B.XI. Cálculo de ΔH_{int} (kW) y cascada de energía del proceso. Parte 3

T*	ΔH_{int}	ΔH_{int}
(°C)	(kW)	(kW)
441.0		0.0
407.0	3171.0	3 171.0
390.0	2916.6	6 087.6
210.0	14094.4	20 181.9
200.0	152.8	20 334.7
190.0	152.8	20 487.5
185.0	131.3	20 618.8
170.2	468.7	21 087.5
152.8	743.9	21 831.3
132.8	929.5	22 760.8
120.0	736.4	23 497.3
119.1	41.8	23 539.1
113.3	291.0	23 830.0
100.0	812.4	24 642.5
95.0	354.2	24 996.7
90.0	159.1	25 155.8
89.1	25.3	25 181.0
80.0	356.0	25 537.0
60.0	561.2	26 098.2
59.7	7.9	26 106.1
50.0	67.2	26 173.2
46.0	-16.4	26 156.8
40.0	-90.5	26 066.4
32.0	-231.3	25 835.1
26.0	-151.2	25 683.9
15.0	151.9	25 835.8
5.0	717.1	26 552.9
-2.9	484.7	27 037.6
-22.9	1636.7	28 674.3
-24.9	167.3	28 841.6
-40.0	2189.8	31 031.3
-90.0	215.1	31 246.5
-95.0	2.8	31 249.3
-152.8	-262.7	30 986.6
-171.6	-88.4	30 898.2
-184.0	-46.29	30 851.9

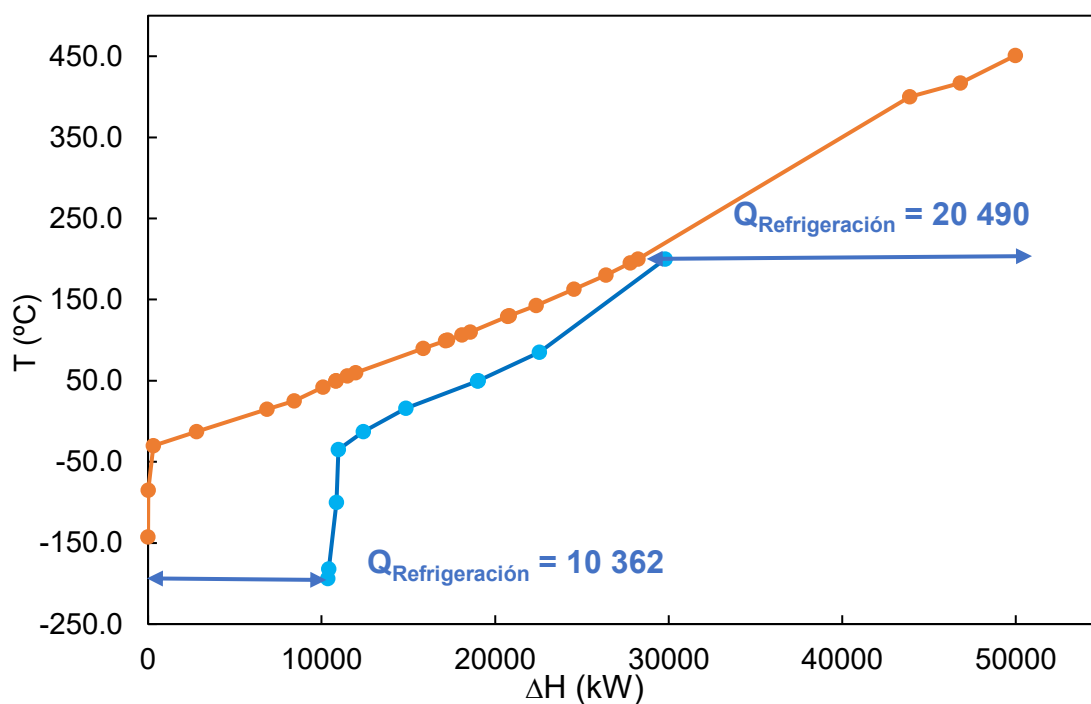


Fig. B.3. Curvas compuestas caliente y fría ($\Delta T_{\min}$ de 20 °C).

B.3. EVALUACIÓN ECONÓMICA

Tabla B. XII. Cálculo de los costes directos e indirectos del proceso.

Table 6-9 Ratio factors for estimating capital investment items based on delivered-equipment cost

Values presented are applicable for major process plant additions to an existing site where the necessary land is available through purchase or present ownership.¹ The values are based on fixed-capital investments ranging from under \$1 million to over \$100 million.

	Percent of delivered-equipment cost for		
	Solid processing plant ¹	Solid-fluid processing plant ²	Fluid processing plant ²
Direct costs			
Purchased equipment delivered (including fabricated equipment, process machinery, pumps, and compressors)	100	100	100
Purchased-equipment installation	45	39	47
Instrumentation and controls (installed)	18	26	36
Piping (installed)	16	31	68
Electrical systems (installed)	10	10	11
Buildings (including services)	25	29	18
Yard improvements	15	12	10
Service facilities (installed)	40	55	70
Total direct plant cost	269	302	360
Indirect costs			
Engineering and supervision	33	32	33
Construction expenses	39	34	41
Legal expenses	4	4	4
Contractor's fee	17	19	22
Contingency	35	37	44
Total indirect plant cost	128	126	144
Fixed-capital investment	397	428	504
Working capital (15% of total capital investment)	70	75	89
Total capital investment	467	503	593

¹Because of the extra expense involved in supplying service facilities, storage facilities, loading terminals, transportation facilities, and other necessary utilities at a completely undeveloped site, the fixed-capital investment for a new plant located at an undeveloped site may be as much as 100 percent greater than that for an equivalent plant constructed as an addition to the existing plant.

²See Table 6-6 for descriptions of types of process plants.

Tabla B.XIII. Aspectos considerados en el cálculo de los costes.

Product:		Capacity, kg/h:	
Operating time, h/yr:		Capacity, kg/s:	
Capacity, kg/yr:		Fixed Capital Investment (FCI)	
		User variables	
	Suggested factor	Rate or quantity per year	Cost per rate or quantity unit
			Calculated values, \$M
Raw materials			
1			
2			
3			
4			
			Total
Operating labor [†]			
Operating supervision	0.15	of operating labor	
Utilities [†]			
Water			
Cooling			
Process			
Electricity			
Fuel			
Refrigeration			
Steam			
Waste treatment and disposal			
Maintenance and repairs	0.07	of FCI	
Operating supplies	0.15	of maintenance and repairs	
Laboratory charges	0.15	of operating labor	
Royalties (if not on lump-sum basis)	0.04	of TPC without depreciation	
Catalysts and solvents			
		Total variable production costs	
Depreciation—calculated separately below			
Taxes (property)	0.02	of FCI	
Financing (interest)	0.00	of FCI	
Insurance	0.01	of FCI	
Rent	0.00	of FCI	
Depreciation [‡]			
[†] Calculated according to MACRS 5-year schedule. (See Chap. 7 for details.)			
Year	% of FCI	Depreciation d_j , \$/yr	TPC = $(d_j + c_u)$, \$/yr
1	20		
2	32		
3	19.2		
4	11.52		
5	11.52		
6	5.76		
7	0		
			Fixed charges (without depreciation)
			Plant overhead costs
			Administrative costs
			Distribution + marketing costs
			Research and development
			General expenses
			Total product cost (without depreciation)

Tabla B.XIV. Número de trabajadores por equipo.

Table B-1 Rates for various industrial utilities[†]

Utility	Cost range (January 2002), \$
Steam:	
3550 kPa	7.70–9.40/1000 kg
790 kPa	4.40–7.50/1000 kg
Exhaust	2.00–3.50/1000 kg
Electricity:	
Purchased	0.040–0.13/kWh [‡]
Self-generated	0.030–0.075/kWh
Cooling water:	
Well	0.05–0.22/m ³
River or salt	0.02–0.06/m ³
Tower	0.02–0.07/m ³
Process water:	
City	0.12–0.46/m ³
Filtered and softened	0.15–0.46/m ³
Distilled	0.60–1.10/m ³
Compressed air:	
Process air	0.25–0.70/100 m ³ (SC) [‡]
Filtered and dried for instruments	0.45–1.30/100 m ³ (SC) [‡]
Natural gas:	
Interstate (major pipeline companies)	10.50–15.80/100 m ³ (SC) [‡]
Intrastate (new contracts)	10.50–16.00/100 m ³ (SC) [‡]
Intrastate (renegotiated or amended contracts)	11.50–19.00/100 m ³ (SC) [‡]
Manufactured gas	7.90–19.40/100 m ³ (SC) [‡]
Fuel oil	113.00–163.00/m ³ (18.00–26.00/bbl)
Coal	39.40–64.00/ton (metric)
Refrigeration (ammonia), to 1°C	0.64/kW refrigeration

Tabla B.XV. Cálculo del VAN del proyecto a 20 años (alternativa 1).

Año	Flujo de caja (M€/año)	$\frac{FC_t}{(1+i)^t}$	$\sum_{t=1}^n \frac{FC_t}{(1+i)^t}$	VAN
1	63.9	58.1	58.1	-317.2
2	65.5	54.1	112.3	-263.0
3	67.2	50.5	162.7	-212.6
4	68.8	47.0	209.7	-165.6
5	70.6	43.8	253.5	-121.8
6	72.3	40.8	294.4	-80.9
7	74.1	38.0	332.4	-42.9
8	76.0	35.4	367.9	-7.4
9	77.9	33.0	400.9	25.6
10	79.8	30.8	431.7	56.4
11	81.8	28.7	460.3	85.1
12	83.9	26.7	487.1	111.8
13	86.0	24.9	512.0	136.7
14	88.1	23.2	535.2	159.9
15	90.3	21.6	556.8	181.5
16	92.6	20.1	576.9	201.7
17	94.9	18.8	595.7	220.4
18	97.3	17.5	613.2	237.9
19	99.7	16.3	629.5	254.2
20	102.2	15.2	644.7	269.4

Tabla B. XVI. Cálculo del VAN del proyecto a 20 años (alternativa 2).

Año	Flujo de caja (M€/año)	$\frac{FC_t}{(1+i)^t}$	$\sum_{t=1}^n \frac{FC_t}{(1+i)^t}$	VAN
1	80.1	72.8	72.8	-302.5
2	82.1	67.8	140.6	-234.7
3	84.1	63.2	203.9	-171.4
4	86.2	58.9	262.8	-112.5
5	88.4	54.9	317.6	-57.7
6	90.6	51.1	368.8	-6.5
7	92.9	47.7	416.4	41.2
8	95.2	44.4	460.9	85.6
9	97.6	41.4	502.2	126.9
10	100.0	38.6	540.8	165.5
11	102.5	35.9	576.7	201.4
12	105.1	33.5	610.2	234.9
13	107.7	31.2	641.4	266.1
14	110.4	29.1	670.5	295.2
15	113.2	27.1	697.6	322.3
16	116.0	25.2	722.8	347.5
17	118.9	23.5	746.3	371.0
18	121.9	21.9	768.2	392.9
19	124.9	20.4	788.7	413.4
20	128.0	19.0	807.7	432.4

APÉNDICE C: NORMATIVA MEDIOAMBIENTAL

C.1. ALMACENAMIENTO DE LAS MATERIAS PRIMAS Y LOS PRODUCTOS

Dentro de una industria química, el almacenamiento, la carga, la descarga y el trasiego de las materias primas y productos del proceso están muy relacionados con la seguridad e integridad de la planta. Por lo tanto, es de vital importancia cumplir con las instrucciones técnicas establecidas.

C.1.1. Almacenamiento del amoniaco

En el Boletín Oficial del Estado (BOE 2017) se define para el producto del proceso (Amoniaco 99.5%) tres tipos de almacenamiento en función de la temperatura y la presión a la que se encuentre. En este estudio, el amoniaco 99.5% se almacena a -33°C y una atmósfera de presión, lo que corresponde a un almacenamiento de tipo refrigerado según el BOE (2017)

El porcentaje de llenado máximo del tanque de almacenamiento se determina con la siguiente Ecuación 27.

$$V_m = 100 \frac{G_m}{P} \quad [27]$$

Donde:

V_m : Volumen máximo admisible (porcentaje).

G_m : Grados de llenado máximo.

P : Densidad de la fase líquida de amoniaco a la temperatura del tanque.

En el caso del producto obtenido según el documento mencionado, el valor de G_m es de 0.64. Además, si se desea obtener la capacidad máxima en kg, se calcula mediante el producto del volumen total del tanque (L) por el valor de G_m .

Finalmente, a la hora de distribuir los tanques de almacenamiento se tendrán en cuenta las distancias mencionadas en el Cuadro II-1 del documento en cuestión (BOE 2017)

Este tipo de almacenamiento ha demostrado ser más económico en cómputo global que el presurizado, ya que, a pesar de que, controlar y mantener estable esta baja temperatura es más caro, los costes de inversión son inferiores. Para los cálculos, se toman en consideración 20 días de almacenamiento. (Appl 2011)

La Normativa API 650 ofrece un estándar para el diseño de tanques de almacenamiento a presión atmosférica a nivel internacional.

Teniendo en cuenta la densidad del amoniaco a 1 atm y -33°C (681.9 kg/m^3), el flujo másico producido y considerando un tiempo de almacenamiento de 20 días, el volumen a almacenar es de 10314 m^3 . Por seguridad, ante imprevistos de producción, se multiplica este volumen por un factor de seguridad de 1.1 (León Estrada 2001), resultando un volumen final de 11343 m^3 . Cuando el almacenamiento ocurre a presión atmosférica, se recomienda emplear un tanque vertical, que puede disponer de techo fijo (más económico) o techo flotante para reducir las pérdidas por evaporación. (Dwijayanti 2012)

Siguiendo los principios de las Reglas Heurísticas (Walas 1988), se opta por un cilindro vertical apoyado sobre soportes de hormigón y con un encamisado exterior que permita mantener la temperatura deseada, evitando que el amoniaco se evapore.

El volumen a almacenar es muy elevado, por tanto, este se repartirá en tres tanques equivalentes, de modo que, el control y las tareas de mantenimiento se puedan realizar correctamente. Además, de este modo, en caso de fallo en alguno de los tanques que produzca fugas o vertidos, se asegurará una parte de la producción y se reducirán las posibles pérdidas. La relación entre altura y el diámetro óptimo es de 1.5 para tanques de almacenamiento (Branan 2005), por tanto, ambas variables se pueden obtener fácilmente conociendo el volumen. Los tres tanques tendrán las mismas dimensiones, un diámetro de 11.9 m y una altura de 17.9 m.

C.1.2. Almacenamiento del hidrógeno

Siguiendo las recomendaciones del MITECO (MITECO 2020) el hidrógeno sobrante del proceso de electrólisis y que no se emplee en el proceso de reacción se almacenará a altas presiones en estado líquido durante cortos periodos de tiempo.

El hidrógeno es un gas de baja densidad por lo que almacenarlo en estado líquido presenta grandes ventajas económicas frente a almacenarlo en estado gaseoso. Sin embargo, el periodo de almacenamiento no puede ser prolongado, ya que el aporte energético encarecería el proceso.

C.2. TRANSPORTE DE LAS MATERIAS PRIMAS Y PRODUCTOS

C.2.1. Transporte del amoníaco

En el Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Carretera (BOE 2025) se establecen las directrices para el transporte seguro de sustancias peligrosas, incluyendo el amoníaco anhidro.

El amoníaco anhidro se clasifica bajo el número ONU 1005 y pertenece a la clase 2 de gases porque es un gas tóxico e inflamable, lo que requiere precauciones especiales durante su manipulación y transporte.

La cantidad máxima total de amoníaco anhidro transportado por cisterna será de 50 kg y las presiones de oscilación máximas oscilarán entre los 29 y los 19.7 bares en función de la cisterna empleada.

C.3. EMISIONES DEL PROCESO

En la ficha técnica de las emisiones del proceso de fabricación de amoníaco establecida por el MITECO (MITECO, Miteco 2019) se observan los principales contaminantes en la síntesis de amoníaco a partir de hidrógeno gris. En este proyecto donde se emplea hidrógeno verde, no se emite dióxido de carbono (CO_2) ni otros compuestos carbonados durante la síntesis de amoníaco.

Además, gracias a reemplazar la combustión del gas natural por la electrólisis del agua, se evitan las emisiones de NO_x y de SO_2 . Estos contaminantes suponen un riesgo para la salud humana, en especial al sistema respiratorio (PRTR España 2025a; 2025b) ya que son tóxicos y nocivos.